

# **Analyse und Parametrisierung eines komplexen Agrarökosystemmodells für Fragestellungen der ökologischen Folgeabschätzung des Energiepflanzenanbaus**

Von der Fakultät für Umweltwissenschaften und Verfahrenstechnik der Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus-Senftenberg zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Diplom-Informatikerin

**Xenia Specka geb. Holtmann**

aus

Neubrandenburg

Gutachter:	Prof. Dr. Albrecht Gnauck
Gutachter:	Prof. Dr. Karl-Otto Wenkel
Gutachter:	Prof. Dr. Florian Jeltsch

Tag der mündlichen Prüfung: 10.01.2014



## Erklärung

Hiermit erkläre ich, Xenia Specka geb. Holtmann, an Eides statt, dass ich die vorliegende Dissertation selbständig verfasst und alle in Anspruch genommenen Hilfsmittel in der Dissertation angegeben habe.

Hiermit erkläre ich, dass die Veröffentlichung der Dissertation keine bestehenden Schutzrechte verletzt.

---

Ort, Datum

---

Unterschrift





# Kurzfassung

In der vorliegenden Arbeit erfolgte sowohl eine Analyse als auch eine Weiterentwicklung des Agrarökosystemmodells MONICA (Model for Nitrogen and Carbon in Agro-ecosystems) für Anwendungen im Rahmen des Energiepflanzenanbaus. Grundlage der Modellanalyse bildeten Sensitivitätsanalysen der Modellparameter mit jeweils unterschiedlichen Fragestellungen. Es wurde eine Methode implementiert, die für die effiziente Durchführung von Sensitivitätsanalysen für komplexe dynamische Ökosystemmodelle mit umfangreicher Parameteranzahl entwickelt wurde.

Mittels der Sensitivitätsanalyse wurden sowohl für eine Modellkalibrierung relevante Parameter identifiziert als auch das Verhalten des Modells analysiert. Dazu wurden die Morris- und die Extended FAST-Methode miteinander kombiniert. Eine eigenständige Implementierung der beiden Methoden ermöglichte die Parallelisierung der Modellberechnungen und die Ausführung auf einem Computer-Cluster. Im ersten Schritt der Sensitivitätsanalyse erfolgte eine Analyse und ein Vergleich der Parametersensitivität für verschiedene Fruchtarten. Anschließend wurden diejenigen Parameter identifiziert, die für einzelne pflanzen- und bodenspezifische Modelloutputs sensitiv waren. In einer zusätzlichen Sensitivitätsanalyse wurde die Variabilität der Parametersensitivität hinsichtlich einzelner Modelloutputs in Abhängigkeit von der Simulationszeit untersucht.

Darauf aufbauend wurde der Anwendungsumfang des Modells für die Simulation von Energiepflanzen durch fruchtartenspezifische Optimierung der Parameter erweitert. Dafür wurde ein allgemeiner Ansatz entwickelt, der eine Kalibrierung von MONICA unter Verwendung einer eingeschränkten Datenbasis ermöglichte. Für die entwickelten Modellparametersätze der untersuchten Fruchtarten erfolgte eine Validierung an unabhängigen Daten. Es wurde gezeigt, dass für die neuen Energiepflanzen mit MONICA sowohl eine gute Abbildung der Ertragsbildungs- als auch der Bodenwasserdynamik erzielt wird.

Abschließend erfolgte eine theoretische Untersuchung verschiedener Ansätze zur Modellvereinfachung und deren Anwendbarkeit in MONICA. Zum einen wurden Ansätze zur Verbesserung des Quellcodes analysiert, die auf eine Verbesserung der Nutzung und Weiterentwickelbarkeit des Modells abzielten. Zum anderen wurden Möglichkeiten zur Vereinfachung der Modellanwendung durch Reduktion des Modellfunktionsumfangs vorgestellt.



## Summary

In this thesis, both analysis and further development of the agro-ecosystem model MONICA (Model for Nitrogen and Carbon in Agro-ecosystems) were conducted for applications in the context of energy crop cultivation. Model analysis included different sensitivity analyses, each with a different objective. A method was used which has been developed for the efficient implementation of sensitivity analyses for complex dynamic ecosystem models with an extensive number of parameters.

Sensitivity analysis was carried out to identify model parameters important for model calibration as well as to analyse the model's behaviour. In this study, the Morris and Extended FAST methods were used in combination. The separate implementation of both methods allowed the parallelisation of model calculations and the execution of code on a multi-core computer cluster. In a first step, sensitivity of model parameters was calculated and analysed for different crops. Subsequently, parameters were identified which were sensitive to individual plant- and soil-specific model outputs. In a further study, the variability of parameter sensitivity as a function of simulation time was investigated for individual model outputs.

Based on these analyses, the range of applications of MONICA was expanded to include new energy crops by crop-specific parameter optimisation. A general approach was developed which enables the calibration of MONICA using a limited data base. The newly developed model parameter sets for the analysed crops were validated against independent data. It was shown that MONICA was able to predict biomass growth and soil moisture dynamics well for the newly integrated energy crops.

Finally, a study of different model simplification approaches and their applicability in MONICA was presented. Different approaches to improve the source-code were analysed which aimed at enhancing the model and its applicability. In addition, possibilities of simplifying the model by reducing the model's functionality were discussed.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Abkürzungssverzeichnis</b>	<b>V</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>VII</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>IX</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Hintergrund . . . . .	1
1.2 Zielstellung . . . . .	2
1.3 Aufbau der Arbeit . . . . .	3
<b>2 Stand des Wissens</b>	<b>5</b>
2.1 Ökosystemmodelle . . . . .	5
2.1.1 Formale Modellbeschreibung . . . . .	5
2.1.2 Modelleigenschaften . . . . .	6
2.2 Sensitivitätsanalyse . . . . .	7
2.2.1 Verfahren der Sensitivitätsanalyse . . . . .	8
2.2.2 Anwendungen in der Ökosystemmodellierung . . . . .	16
2.3 Modellkalibrierung und Parameteroptimierung . . . . .	16
2.3.1 Klassische Parameterschätzverfahren . . . . .	17
2.3.2 Bayes'sche Ansätze . . . . .	18
2.3.3 Optimierungsverfahren . . . . .	19
2.4 Komplexität von Ökosystemmodellen . . . . .	22
2.4.1 Modellkomplexität - Definition und Quantifizierung . . . . .	24
2.4.2 Vereinfachung von Modellen . . . . .	26
<b>3 MONICA - Modell für Kohlenstoff und Stickstoff in Agrarökosystemen</b>	<b>29</b>
3.1 Beschreibung der Boden- und Pflanzenprozesse . . . . .	29
3.2 Strukturelle und technische Details . . . . .	31
3.3 Eingangsdaten des Modells . . . . .	34
3.4 Softwaretechnische Realisierung . . . . .	36
<b>4 Material und Methoden</b>	<b>39</b>
4.1 Datengrundlage der Modellsimulationen . . . . .	39

4.1.1	Versuchsstandorte . . . . .	39
4.1.2	Fruchtfolge-Experimente . . . . .	40
4.1.3	Messdaten . . . . .	44
4.2	Sensitivitätsanalyse . . . . .	44
4.2.1	Das Screening-Design nach Morris . . . . .	45
4.2.2	Extended FAST . . . . .	47
4.2.2.1	Erzeugung der Parameter-Samples . . . . .	47
4.2.2.2	Berechnung der Sensitivitätsmaße . . . . .	48
4.2.3	Korrelationen von Modellparametern . . . . .	50
4.2.4	Implementierung . . . . .	50
4.2.4.1	Softwaretechnische Realisierung . . . . .	50
4.2.4.2	Parallelisierung und Speed-Up . . . . .	52
4.3	Die Optimierungssoftware HOPSPACK . . . . .	54
4.3.1	Generating Set Search (GSS) . . . . .	55
4.3.2	Architektur von HOPSPACK . . . . .	56
4.3.3	Kopplung von MONICA und HOPSPACK . . . . .	57
4.4	Statistische Gütemaße zur Validierung von MONICA . . . . .	58
4.5	Die Rechen- und Simulationsumgebung . . . . .	59
<b>5</b>	<b>Sensitivitätsanalysen von MONICA</b>	<b>61</b>
5.1	Selektion der Modellparameter und Definition des Wertebereichs . . . . .	61
5.2	Sensitivitätsanalyse für verschiedene Fruchtarten . . . . .	65
5.2.1	Simulationsszenario . . . . .	66
5.2.2	Morris-Screening . . . . .	67
5.2.3	Haupt- und Totaleffekte . . . . .	70
5.2.4	Vergleich der Parametersensitivität verschiedener Fruchtarten . . . . .	71
5.3	Sensitivitätsanalyse für verschiedene Outputs . . . . .	74
5.3.1	Simulationsszenario . . . . .	75
5.3.2	Morris-Screening . . . . .	76
5.3.3	Haupt- und Totaleffekte . . . . .	78
5.3.4	Vergleich der Parametersensitivität verschiedener Modelloutputs . . . . .	78
5.3.4.1	Pflanzenspezifische Outputs . . . . .	81
5.3.4.2	Bodenspezifische Outputs . . . . .	81
5.3.5	Untersuchung der Zeitabhängigkeit der Parametersensitivitäten . . . . .	82
5.4	Speed-Up der Parallelisierung . . . . .	91
5.5	Diskussion . . . . .	92
<b>6</b>	<b>Parametrisierung von MONICA</b>	<b>97</b>
6.1	Versuchsaufbau der Optimierung . . . . .	98

6.1.1	Spezifikation der Zielfunktion . . . . .	98
6.1.2	Parameter-Wertebereich der Optimierung . . . . .	99
6.1.3	Unterteilung der Kalibrierungs- und Validierungsdatensätze . . . . .	100
6.2	Parameter-Optimierung . . . . .	102
6.3	Simulation der EVA-Fruchtfolgen . . . . .	104
6.4	Diskussion . . . . .	108
<b>7</b>	<b>Möglichkeiten und Konsequenzen der Vereinfachung von MONICA</b>	<b>111</b>
7.1	Ziel der Modellvereinfachung . . . . .	111
7.2	Anwendung verschiedener Vereinfachungstechniken . . . . .	111
7.2.1	Verbesserung des Modell-Quellcodes . . . . .	112
7.2.2	Konstantsetzen von Modellparametern . . . . .	114
7.2.3	Ersetzung von Modellvariablen . . . . .	115
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>119</b>
8.1	Zusammenfassung . . . . .	119
8.2	Ausblick . . . . .	121
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>123</b>
	<b>Anhang</b>	<b>139</b>
<b>A</b>	<b>Spezifikation des Wertebereichs der untersuchten Modellparameter</b>	<b>139</b>
<b>B</b>	<b>Weitere Abbildungen zu den SA - Ergebnissen</b>	<b>145</b>





# Abkürzungsverzeichnis

<b>AGB</b>	Above-Ground Biomass
<b>AIC</b>	Akaike's Informationskriterium
<b>BIC</b>	Bayes Informationskriterium
<b>C</b>	Kohlenstoff
<b>C<sub>org</sub></b>	Anteil des organischen Kohlenstoffs im Boden
<b>CarBioCial</b>	C-Sequestrierung, Biodiversität und soziale Strukturen in Süd-Amazonien: Modelle und die Implementierung Kohlenstoff (C)-optimierter Landmanagementstrategien, BMBF Förderschwerpunkt Nachhaltiges Landmanagement
<b>CCA</b>	Common Component Architecture
<b>DB</b>	Datenbank
<b>DAISY</b>	Open software model integrating processes for soil, crop and atmosphere (Abrahamsen and Hansen 2000)
<b>DSS</b>	Decision Support System - Entscheidungsunterstützungssystem
<b>EVA</b>	'Entwicklung und Vergleich von optimierten Anbausystemen für die landwirtschaftliche Produktion von Energiepflanzen unter verschiedenen Standortbedingungen Deutschlands', Laufzeit: 2005 – 2008
<b>EVA 2</b>	'Standortangepasste Anbausysteme für die Produktion von Energiepflanzen', Laufzeit: 2009 – 2012
<b>EE</b>	Elementare Effekte
<b>ET<sub>0</sub></b>	Potentielle Evapotranspiration
<b>ET<sub>akt</sub></b>	Aktuelle Evapotranspiration
<b>Extended FAST</b>	Extended Fourier Amplitude Sensitivity Test
<b>EF</b>	Modelling Efficiency
<b>FAST</b>	Fourier Amplitude Sensitivity Test
<b>GNU L-GPL</b>	GNU Lesser General Public License
<b>GLUE</b>	Generalised Likelihood Uncertainty Estimation
<b>GSS</b>	Generating set search
<b>GUI</b>	Graphical user interface
<b>HERMES</b>	Ein am ZALF entwickeltes Simulationsmodell für die Abbildung der Stickstoffdynamik an Ackerstandorten (Kersebaum and Richter 1991)
<b>HPC</b>	High performance computer - Hochleistungsrechner mit mehreren Prozessorkernen, auch Rechner-Cluster genannt.
<b>HOPSPACK</b>	Hybrid Optimization Parallel Search Package
<b>HAF</b>	Hafer
<b>KLK</b>	Klee gras
<b>LAI</b>	Blattflächenindex
<b>LCC</b>	Linearer Korrelationskoeffizient
<b>LZG</b>	Luzerne gras

---

<b>LandCaRe-DSS</b>	Modellbasierte Wissensplattform zur Entscheidungsunterstützung (Wenkel et al. 2013)
<b>MONICA</b>	Model for Nitrogen and Carbon in Agro-ecosystems
<b>MPI</b>	Message Passing Interface
<b>MBE</b>	Mean Bias Error
<b>MAE</b>	Mean Absolute Error
<b>ML</b>	Maximum Likelihood
<b>MAI</b>	Mais
<b>N</b>	Stickstoff
<b>N<sub>min</sub></b>	Mineralischer Stickstoff im Boden
<b>nMAE</b>	Normalised Mean Absolute Error
<b>nMBE</b>	Normalised Mean Bias Error
<b>OpenMI</b>	Open Modeling Interface and Environment
<b>PCC</b>	Partieller Korrelationskoeffizient
<b>PHA</b>	Phacelia
<b>RMSE</b>	Root Mean Square Error
<b>RC</b>	Regressionskoeffizient
<b>RBD</b>	Random Balanced Design
<b>SA</b>	Sensitivitätsanalyse
<b>SUCROS</b>	Simple and Universal Crop growth Simulator (Van Keulen et al. 1982)
<b>SWIG</b>	Simplified Wrapper Interface Generator
<b>SRC</b>	Standardisierter Regressionskoeffizient
<b>SPC</b>	Semi-partieller Korrelationskoeffizient
<b>SG</b>	Sommergerste
<b>STR</b>	Sommertriticale
<b>SUD</b>	Sudangras
<b>STD</b>	Standardabweichung
<b>nSTD</b>	normierte Standardabweichung
<b>SIC</b>	Schwarz Kriterium
<b>WW</b>	Winterweizen
<b>WTR</b>	Wintertriticale
<b>WG</b>	Wintergerste
<b>WRA</b>	Winterraps
<b>WDG</b>	Weidelgras
<b>ZR</b>	Zuckerrübe

# Abbildungsverzeichnis

3.1	Darstellung der Boden- und Pflanzenprozesse von MONICA. . . . .	30
3.2	Aufbau des MONICA-Modells. . . . .	32
3.3	Auszug aus der EVA-Projektdatenbank. . . . .	33
3.4	Vereinfachtes Klassendiagramm der aktuellen Implementierung von MONICA. .	36
4.1	Versuchsstandorte der EVA-Projekte. . . . .	40
4.2	Beispiel eines rasterbasierten Untersuchungsraums der Morris-Methode für zwei Parameter $x_1$ und $x_2$ . . . . .	46
4.3	(a) Suchfunktionen zweier Parameter $x_1$ und $x_2$ . (b) Resultierende Abdeckung des Parametersuchraums durch Erzeugung von Samples für $x_1$ und $x_2$ . . . . .	48
4.4	Schematischer Ablauf der implementierten SA und realisierten Parallelisierung. .	54
4.5	Architektur von HOPSPACK (Plantenga 2009). . . . .	56
4.6	Ablauf der Kommunikation zwischen HOPSPACK und MONICA. . . . .	57
4.7	Schematische Darstellung des HPC-Systems des ZALF (Wieland et al. 2012) . .	60
5.1	Teilergebnisse des Morris-Screening. Gegenüberstellung von $\mu^*$ und $\sigma$ exemplarisch für Winterweizen und Mais. . . . .	68
5.2	Darstellung der Haupt- und Totaleffekte der analysierten Modellparameter mittels der Extended FAST-Methode exemplarisch für Winterweizen und Mais. . . . .	70
5.3	Gegenüberstellung der berechneten Totaleffekte der untersuchten Fruchtarten. . .	73
5.4	Ergebnisse des Morris-Screenings. Gegenüberstellung von $\mu^*$ und $\sigma$ der untersuchten Modelloutputs. . . . .	76
5.5	Quantifizierung der Haupt- und Totaleffekte der untersuchten Modellparameter für die Outputs $Yield$ und $N_{min}$ . . . . .	78
5.6	Gegenüberstellung der berechneten Totaleffekte der untersuchten Modelloutputs am Beispiel von Winterweizen. . . . .	80
5.7	Gegenüberstellung der Totaleffekte bei der Simulation von Winterweizen zweier pflanzenspezifischer Outputs in Form von Scatterplots. . . . .	82
5.8	Gegenüberstellung der Totaleffekte bei der Simulation von Winterweizen von jeweils zwei bodenspezifischen Outputs in Form von Scatterplots. . . . .	83
5.9	Klimatische Eingangsdaten der Simulationen. . . . .	84
5.10	Entwicklung der oberirdischen Biomasse und der resultierenden Standardabweichung (oben) sowie der Parametersensitivität (unten) beim Anbau von Winterweizen. 85	
5.11	Darstellung der Ertragsentwicklung sowie der Parametersensitivität beim Anbau von Winterweizen . . . . .	86

5.12	Entwicklung der Wurzelbiomasse sowie der Parametersensitivität des Wurzelwachstums beim Anbau von Winterweizen. . . . .	86
5.13	Entwicklung des photosynthetisch erzeugten Bruttopräprimärprodukts (GPP) der Pflanze sowie der Parametersensitivität von GPP beim Anbau von Winterweizen. . . .	87
5.14	Entwicklung der Gesamtatmung der Pflanze sowie der Parametersensitivität von $R_a$ beim Anbau von Winterweizen. . . . .	88
5.15	Entwicklung des Bodenwassergehalts sowie der Parametersensitivität des Outputs beim Anbau von Winterweizen. . . . .	88
5.16	Entwicklung des $N_{min}$ -Gehalts im Boden sowie der Parametersensitivität des Outputs beim Anbau von Winterweizen. . . . .	89
5.17	Verlauf der Bodentemperatur sowie der Parametersensitivität des Outputs beim Anbau von Winterweizen. . . . .	90
5.18	Verlauf des $C_{org}$ -Gehalts im Boden sowie der Parametersensitivität des Outputs beim Anbau von Winterweizen. . . . .	90
5.19	Ausführungszeit der Analyse eines Parameters bei der Verwendung einer unterschiedlichen Anzahl an Prozessoren und Darstellung des resultierenden Speed-Ups. . . . .	92
6.1	Darstellung des Optimierungstests bei der Optimierung der sensitiven Parameter von $Moist_{30}$ und $Nmin_{30}$ zur Identifikation der zu verwendenden Outputs am Beispiel von Mais. . . . .	99
6.2	nMAE der Pflanzenhöhe von Sudangras in Abhängigkeit der Parameter $cropHeightP1$ und $cropHeightP2$ . . . . .	101
6.3	Darstellung des Optimierungsergebnisses für Ertrag (Yield) und Bodenwassergehalt in 0-90 cm (Moist) für Mais zur Identifikation der optimalen Anzahl an Standorten, deren Daten in der Optimierung eingesetzt werden. . . . .	102
6.4	Vergleich der Performanz der optimierten Parametersätze der Kalibrierungs- und Validierungsdaten von Zuckerhirse und Klee gras. . . . .	103
6.5	Auswertung des nMAE über alle untersuchten Fruchtarten. Darstellung des mittleren, individuellen nMAEs der untersuchten Fruchtarten neben den Boxplots. . .	104
6.6	Beispielsimulation der Fruchtfolge FF02 in Werlte (1. Wiederholung, EVA). . . .	105
6.7	nMAE der simulierten Fruchtfolgen für die Outputs $Yield$ , $NConc$ und $N_{min}$ . Darstellung des mittleren, individuellen nMAE's der EVA-Versuchsstandorte. . . . .	106
A.1	Vollständige Ergebnisse des Morris-Screenings. . . . .	147
A.2	Vollständige Ergebnisse der Extended FAST für jede untersuchte Fruchtart. . . .	150
A.3	Ergebnisse des Morris-Screenings. Gegenüberstellung von $\mu^*$ und $\sigma$ der untersuchten Modelloutputs. . . . .	153
A.4	Vollständige Ergebnisse der Extended FAST für verschiedene Modelloutputs am Beispiel von Winterweizen. . . . .	156

# Tabellenverzeichnis

3.1	Eingangsvariablen zur Beschreibung eines Anbausystems in MONICA. . . . .	34
3.2	Angaben zu Standort- und Bodeninformationen in MONICA. . . . .	35
3.3	Beschreibung der Klimaeingangsdaten für die Simulation mit MONICA. . . . .	35
4.1	Bodenkundliche und klimatische Eigenschaften der Versuchsstandorte. Gemittelte Werte der Versuchsstandorte der Jahre 2005-2011. . . . .	39
4.2	Fruchtarten der Standardfruchtfolgen des Grundversuches der zwei EVA-Projekte (S=Sommer, W=Winter). Der Anbau der Standardfruchtfolgen erfolgte an allen Versuchsstandorten. . . . .	41
4.3	Regionalfruchtfolgen des ersten EVA-Projekts. . . . .	42
4.4	Regionalfruchtfolgen in EVA 2. . . . .	43
4.5	Überblick über die für die Parametrisierung zur Verfügung stehenden Messwerte der EVA-Projekte. . . . .	44
4.6	Vergleich von bestehenden Software-Tools zur Durchführung der SA. . . . .	51
5.1	Beschreibung der Parameter, die in den Sensitivitätsanalysen untersucht wurden. . . . .	62
5.2	Zusammenfassung der verwendeten Wetterdaten aus Ascha für den Untersuchungszeitraum von 2005-2008. . . . .	66
5.3	Spezifikation des individuellen Anbaumanagements der untersuchten Fruchtarten. . . . .	67
5.4	Parameter-Ranking der Modellparameter des MONICA-Modells basierend auf den Ergebnissen der Morris-SA differenziert nach Fruchtarten. . . . .	69
5.5	Ergebnisse der Extended FAST. Totaleffekte der analysierten Parameter differenziert nach Fruchtarten. . . . .	71
5.6	Definition von Fruchtartengruppen mit physiologisch ähnlichen Charakteristika. . . . .	72
5.7	Modelloutputs von MONICA, die in der SA untersucht wurden. . . . .	75
5.8	Spezifikation des Anbaumanagements von Winterweizen. . . . .	76
5.9	Parameter-Ranking der Modellparameter des MONICA-Modells basierend auf den Ergebnissen der Morris-SA für verschiedene Modelloutputs. . . . .	77
5.10	Ergebnisse der Extended FAST. Totaleffekte der analysierten Parameter der untersuchten Modelloutputs. . . . .	79
5.11	Beschreibung der Entwicklungsstadien von Winterweizen. . . . .	85

---

6.1	Fruchtartenüberblick: (1) über die in MONICA integrierten Fruchtarten zu Beginn des EVA 2-Projektes (Stand 2009), (2) über die fehlenden Fruchtarten zur Auswertung der Standardfruchtfolgen von EVA und EVA 2 und (3) über Fruchtarten, für die mit Hilfe der Parameter-Optimierung ein neuer Parametersatz im MONICA-Modell erstellt wurde. . . . .	97
6.2	Beschreibung der vier definierten Optimierungsexperimente zur Parametrisierung des MONICA-Modells. . . . .	100
6.3	Statistische Gütemaße zur Validierung des MONICA Modells anhand der Simulationen der Standardfruchtfolgen der EVA-Projekte. Median der Gütemaße über die Simulationen aller Versuchsstandorte. . . . .	107
A.1	Beschreibung der verwendeten Parameter-Wertebereiche für Winterweizen, Wintertriticale, Wintergerste, Winterraps und Sommergerste. . . . .	139
A.2	Beschreibung der verwendeten Parameter-Wertebereiche für Sommertriticale, Zuckerrübe, Phacelia, Klee gras und Luzerne gras. . . . .	141
A.3	Beschreibung der verwendeten Parameter-Wertebereiche für Mais, Sudangras, Weidelgras und Hafer. . . . .	143

# 1 Einleitung

## 1.1 Hintergrund

Bei der Untersuchung von Ökosystemen werden Modelle zur Folgeabschätzung eingesetzt, um den Einfluss veränderter Umweltfaktoren zu untersuchen (White et al. 2011). Ein solches Ökosystemmodell bildet die relevanten Größen, Prozesse und Zusammenhänge des betrachteten Ökosystems ab. Die Anwendungsmöglichkeiten von Ökosystemmodellen erstrecken sich von der Analyse des Systemverhaltens veränderter Einflussfaktoren, dem Testen von Hypothesen, der Entscheidungsunterstützung durch den Vergleich verschiedener Szenarien, bis zum Extrapolieren von Konsequenzen für experimentell nicht messbare Bedingungen. Parallel zum kontinuierlichen Fortschritt der Rechentechnik und der dadurch potentiell steigenden Rechenleistung kam es auch zu einer Zunahme bei der Entwicklung computergestützter Modelle. Dies hatte auch einen Aufschwung bei der Entwicklung von Ökosystemmodellen für unterschiedliche Fragestellungen zur Folge.

Eine aktuelle Fragestellung im Agrar- und Umweltbereich stellt der Energiepflanzenanbau und dessen Folgewirkungen auf die Umwelt dar (Anton and Steinicke 2012). Diskussionsschwerpunkt ist dabei auch die Verwendung von eigens für die Bioenergiegewinnung angebauten Energiepflanzen an Stelle der Verwendung von biologischen Abfallprodukten wie Gülle. Dies bedingt veränderte Anbauverhältnisse im Vergleich zur bisherigen konventionellen Landwirtschaft. Weiterhin führt der Energiepflanzenanbau zu einer Veränderung der Anbausysteme wie z.B. den Maismonokulturen oder dem Zweikulturnutzungssystem. Auch zeichnet sich der vermehrte Energiepflanzenanbau durch einen erhöhten Grünlandumbruch aus (Schöne 2007), dessen Auswirkungen derzeit nicht absehbar sind. Während bei der konventionellen Landwirtschaft zahlreiche Studien über die praktizierten Anbauverfahren existieren, sind die komplexen Auswirkungen des Energiepflanzenbaus auf einzelne Umweltfaktoren nicht ausreichend bekannt (Edenhofer et al. 2011). Dementsprechend besteht Forschungsbedarf bei der Ermittlung standortbezogen geeigneter Energiepflanzenanbausysteme und der Aufklärung von deren Kurz- und Langzeitfolgen auf die Umwelt.

Zur Schließung dieser Wissenslücken erfolgte die Initiierung verschiedener Forschungsprojekte wie z.B. EVA oder EVA 2 (Vetter et al. 2011), die sich mit der Untersuchung von Energiepflanzen und -anbausystemen unter verschiedenen Standortbedingungen Deutschlands befassen. Im Rahmen der Projekte können nur begrenzt Umweltgrößen gemessen und bonitiert werden. Wichtige Größen wie Sickerwasser und Nitrataustrag im Kontext von Energiepflanzenanbausystemen sind aufgrund von kapazitiven und finanziellen Anforderungen nur vereinzelt messbar. Da eine messtechnisch basierte Bestimmung der Größen für alle Anbausystem-Standort-Kombinationen zu aufwendig ist, bietet sich zur Quantifizierung dieser Größen der Einsatz von Agrarökosystemmodellen an. Innerhalb der initiierten Energiepflanzenprojekte wurde das komplexe, prozessorientierte Agrarökosystemmodell MONICA (Model for Nitrogen and Carbon in Agro-ecosystems, Nendel et al. 2011a) zur Spezifizierung von Sickerwasser und Nitrataustrag eingesetzt.

Simulationsmodelle sind durch eine Vielzahl von Unsicherheiten – verursacht durch die Unsicherheit der Eingangsvariablen und Modellparameter, durch die Wahl der Modellstruktur und

durch die algorithmische und programmtechnische Realisierung – gekennzeichnet (Karanki et al. 2009). Parameterunsicherheiten werden aufgrund qualitativ schlechter Kalibrierungs- und Validierungsdatensätze, die zur Herleitung der Parameter verwendet wurden, verursacht. Fehler in der Erhebung von Messdaten bzw. bei der Datenaufbereitung tragen zusätzlich zur Unsicherheit der Eingangsvariablen bei. Für einen verantwortungsvollen Einsatz von Agrarökosystemmodellen ist es notwendig, Kenntnisse über die im Modellergebnis enthaltene Unsicherheit zu besitzen. Nur wenn bekannt ist, wie hoch die Unsicherheit im Ergebnis ist und welche Parameter am stärksten zur Unsicherheit beitragen, können die Ergebnisse richtig interpretiert und zur Entscheidungsunterstützung verwendet werden. Zur Quantifizierung der Unsicherheiten bietet sich der Einsatz von Sensitivitätsanalysen (SA) an. Diese sind im Bereich der Ökosystemmodellierung ein wichtiges Instrument der Modellanalyse (Wallach et al. 2006). Mit Hilfe der SA können Schlüsselkomponenten des Modells sowie sensitive Eingangsvariablen und Modellparameter, die am stärksten zur Modellunsicherheit beitragen (Confalonieri 2012), identifiziert werden.

Ökosystemmodelle sind oft das Ergebnis jahrelanger Entwicklungsarbeit im Wechselspiel zwischen Versuchsansteller und Modellentwickler. In den Modellen ist in der Regel eine detaillierte Abbildung von Zusammenhängen und Abhängigkeiten des betrachteten Systems realisiert. In dem Bestreben einer möglichst realistischen Abbildung der betrachteten Prozesse neigen Modellierer zur Entwicklung von hochkomplexen und meist überparametrisierten Modellen (Crout et al. 2009). Es existiert eine kontroverse Diskussion im Bereich der ökologischen Modellierung über die Wahl der angemessenen Modellkomplexität (Edmonds 2000; Arhonditsis and Brett 2004; Perrin et al. 2001; Innis and Rexstad 1983). Es zeigt sich eine Abhängigkeit zwischen der Komplexität und dem jeweiligen Einsatzzweck eines Modells (Paudel and Jawitz 2012). Für viele Fragestellungen werden oft komplexe, überparametrisierte Modelle eingesetzt. Infolgedessen ist die Notwendigkeit zur Entwicklung von Ansätzen zur Modellvereinfachung und damit zur Reduktion der Modellkomplexität gegeben.

## 1.2 Zielstellung

Den Schwerpunkt dieser Arbeit bildet die Analyse und die Weiterentwicklung des Agrarökosystemmodells MONICA (Nendel et al. 2011a). Zu diesem Zweck erfolgt die Durchführung von Sensitivitätsanalysen (SA), die einerseits der Validierung des Modellverhaltens dienen, in dem durch Variation der Modellparameter das resultierende Outputverhalten überprüft wird. Andererseits zielen sie auf die Identifikation der relevanten Modellparameter zur Unterstützung der Modellparametrisierung ab. Mit Hilfe der SA erfolgt eine Untersuchung der folgenden Fragestellungen:

1. Welche Parameter zählen zu den sensitivsten bei der Simulation verschiedener Fruchtarten?
2. Unterscheidet sich die Parametersensitivität bei der Simulation verschiedener Fruchtarten?
3. Besitzen Fruchtarten mit physiologisch ähnlichen Eigenschaften ähnliche Parametersensitivitäten?
4. Welche Parameter sind bei Betrachtung der einzelnen pflanzen- und bodenspezifischen Modelloutputs besonders sensitiv?
5. Existieren Interaktionen zwischen den Modellparametern und wie hoch sind diese?



Für die Durchführung von SA für komplexe Agrarökosystemmodelle mit umfangreicher Parameteranzahl sind IT-Lösungen zu entwickeln, die zur Verfügung stehende Rechen-Cluster nutzen können.

Die Anwendung von MONICA zur Bewertung der Folgewirkungen des Energiepflanzenanbaus in der Agrarlandschaft erfordert die Parametrisierung des Modells für verschiedene neue Energiepflanzen. Die zur Verfügung stehende räumliche Datenbasis ist aber nicht für eine ausreichend genaue Modellkalibrierung ausgelegt. Erforderliche Daten zum Biomasseaufwuchs, zur N-Konzentration in der Pflanze, zum Bodenwassergehalt oder zum Boden-N<sub>min</sub>-Gehalt stehen nicht in der notwendigen räumlichen und zeitlichen Auflösung zur Verfügung. Aufgrund dieser Tatsache stellt die Parametrisierung von MONICA für verschiedene Energiepflanzen eine Herausforderung dar. Zur Lösung des Problems ist eine Methodik zu entwickeln, die eine Parametrisierung des Modells für neue Fruchtarten mit Hilfe der nur begrenzt zur Verfügung stehenden Daten ermöglicht. Nach erfolgter Parametrisierung ist die Modellgüte bei der Simulation der neu kalibrierten Energiepflanzen zu evaluieren.

In einer weiteren Analyse des Modells sollen Möglichkeiten zur Modellvereinfachung identifiziert werden. Ziel der Vereinfachung ist die Erleichterung sowohl der Weiterentwicklung des Modells durch den Modellierer als auch der Anwendbarkeit des Modells durch die Modellnutzer. Verschiedene Modellvereinfachungsansätze sind hinsichtlich ihrer Anwendung für MONICA zu überprüfen.

## 1.3 Aufbau der Arbeit

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: Nach der Einleitung (**Kapitel 1**) erfolgt in **Kapitel 2** eine Beschreibung des aktuellen Wissenstandes der für diese Arbeit relevanten Themengebiete. Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird eine allgemeine Einführung über Ökosystemmodelle und nachfolgend ein Überblick über aktuelle Verfahren der Sensitivitätsanalyse gegeben. Anschließend erfolgt eine Übersicht verschiedener Ansätze der Modellkalibrierung und Parameteroptimierung. Im letzten Abschnitt des Kapitels werden aktuelle Arbeiten zur Definition des Modellkomplexitätsbegriffs und zu Ansätzen der Modellvereinfachung vorgestellt.

**Kapitel 3** liefert eine Beschreibung des Agrarökosystemmodells MONICA. Es werden relevante Boden- und Pflanzenprozesse des Modells beschrieben, anschließend werden der Modellaufbau sowie technische Details des Modells präsentiert. In den letzten beiden Abschnitten des Kapitels werden die Eingangsdaten des Modells sowie Details der software-technischen Implementierung dargelegt.

**Kapitel 4** gibt einen Überblick über die in dieser Arbeit benutzten Methoden und Werkzeuge. Im ersten Abschnitt wird die zur Verfügung stehende Datenbasis vorgestellt. Im zweiten Abschnitt erfolgt eine theoretische Beschreibung der in den Sensitivitätsanalysen von MONICA eingesetzten und implementierten Verfahren. Anschließend wird die in der Parametrisierung des Modells eingesetzte Optimierungssoftware und dessen Optimierungsansatz dargelegt. Danach werden verschiedene Gütemaße, die zur Validierung des Modells im Rahmen der Parametrisierung eingesetzt werden, erläutert. Im letzten Abschnitt wird die eingesetzte Rechenumgebung zur Durchführung der SA und der Parametrisierung vorgestellt.

Die Präsentation der Ergebnisse der SA von MONICA erfolgt in **Kapitel 5**. Zunächst wird der den Analysen zu Grunde liegende Rahmen mit einer Beschreibung der selektierten Modellpara-

meter sowie des untersuchten Wertebereichs, vorgestellt. Im Anschluss erfolgt eine Präsentation der Ergebnisse der ersten SA, in der die Parametersensitivität des Modells für ausgewählte Fruchtarten untersucht wurde. Der nächste Abschnitt enthält eine Vorstellung der Ergebnisse, die sich auf die Untersuchung der Parametersensitivität verschiedener Modelloutputs fokussiert. Anschließend werden die Ergebnisse der Analysen vorgestellt, bei denen die Veränderung der Sensitivität der Modellparameter in Abhängigkeit von der Simulationszeit untersucht wurde. Daraufhin folgt ein Abschnitt, in dem die erzielte Zeitersparnis, aufgrund der Nutzung des zur Verfügung stehenden Rechen-Clusters, veranschaulicht wird. Das Kapitel schließt mit einer Diskussion über die Stärken und Schwächen der durchgeführten SA ab.

In **Kapitel 6** werden die Ergebnisse der Parametrisierung von MONICA dargestellt. Der erste Abschnitt enthält eine Beschreibung der verwendeten Konfiguration, die bei der Parameteroptimierung eingesetzt wurde. Im Anschluss folgt die Darstellung der Kalibrierungsergebnisse des Modells für neue Fruchtarten. Darauf folgend werden die entwickelten Parametersätze zur Simulation der zur Verfügung stehenden Daten eingesetzt und evaluiert. In der anschließenden Diskussion werden die Ergebnisse der Parametrisierung kontrovers betrachtet.

Eine Diskussion über mögliche Modellvereinfachungsansätze und deren Anwendbarkeit auf das MONICA-Modell wird in **Kapitel 7** dargelegt. Ausgehend von der Beschreibung des Ziels der Modellvereinfachung von MONICA wird auf verschiedene Vereinfachungstechniken eingegangen. **Kapitel 8** beinhaltet eine Zusammenfassung der Arbeit. Weiterhin werden in diesem Kapitel zusätzliche Entwicklungsmöglichkeiten und Anwendungen von MONICA aufgezeigt.

## 2 Stand des Wissens

Dieses Kapitel beschreibt den aktuellen Stand des Wissens der für diese Arbeit relevanten Themengebiete. Zunächst wird eine kurze Einführung in die Thematik der Ökosystemmodelle gegeben. Anschließend werden verschiedene Verfahren der Sensitivitätsanalyse beschrieben, die im Rahmen dieser Dissertation untersucht worden sind. Im nächsten Abschnitt werden grundlegende Verfahren der Parameteroptimierung vorgestellt. Abschließend werden in der Literatur diskutierte Möglichkeiten zur Modellvereinfachung präsentiert.

### 2.1 Ökosystemmodelle

Ökosystemmodelle sind Abbildungen der Realität, bei denen das ökologische System in mathematisch fassbare Zusammenhänge dargestellt wird. Modelle sind eine Annäherung an die Realität, die schrittweise entwickelt, validiert und optimiert werden müssen. Ökosystemmodelle werden eingesetzt, um die Auswirkungen verschiedener Landnutzungsänderungen, die nur eingeschränkt und über einen langen Zeitraum am realen System beobachtet werden können, zu untersuchen. Aufgrund der Komplexität des realen Systems ist die vollständige Darstellung aller Aspekte und Prozesse des realen Systems in Ökosystemmodellen nicht möglich.

#### 2.1.1 Formale Modellbeschreibung

Es existieren verschiedene Beschreibungsformen für Ökosystemmodelle. Eine allgemeine Variante ist die, bei der sowohl der Zustand als auch die zeitliche Änderung des natürlichen Systems beschrieben wird. Zur Abbildung der zeitlichen Änderung werden Systemzustände und dessen Outputs zu diskreten Zeitpunkten berechnet.

Formal gesehen bestehen mathematische Modelle aus Gleichungen und numerischen Daten, die das Verhalten des untersuchten Systems quantitativ beschreiben (Wallach et al. 2006). Dabei lässt sich ein dynamisches, zeitabhängiges Modell  $Y(t)$  mit

$$Y(t) = f [ V(t), Z(t), X ] \quad (2.1)$$

und

$$\begin{aligned} Y(t) &= [ y_1(t), \dots, y_k(t) ] \\ V(t) &= [ v_1(t), \dots, v_m(t) ] \\ Z(t) &= [ z_1(t), \dots, z_s(t) ] \\ X &= [ x_1, \dots, x_n ] \end{aligned} \quad (2.2)$$

und

$$Z(t) = g [ V(t), Z(t), X ] \quad (2.3)$$

mit

$$\begin{aligned} z_1(t + \Delta t) &= z_1(t) + g_1 [ Z(t), V(t), X ] \\ &\vdots \\ z_s(t + \Delta t) &= z_s(t) + g_s [ Z(t), V(t), X ] \end{aligned} \quad (2.4)$$

und  $t$  als Zeit beschreiben.  $\Delta t$  ist ein diskreter Zeitschritt, der bei Ökosystemmodellen oft einen Tag beträgt.  $V(t)$  ist ein Inputvektor von Modelleingangsvariablen wie z.B. die mittlere Lufttemperatur, die tägliche Niederschlagssumme, die Bodenart oder Art und Menge der Düngung.  $Y(t)$  ist ein Outputvektor wie z.B. Ertrag, Nitrataustrag oder Sickerwassermenge.  $Z(t)$  ist ein Vektor, der die Modellzustände wie z.B. den Wassergehalt im Boden, Pflanzenhöhe oder  $N_{min}$ -Gehalt im Boden speichert.  $X$  ist ein Vektor von Modellparametern, die während der Simulation konstant sind. Die genauen Werte der Modellparameter von Ökosystemmodellen sind oft unbekannt. Sie können entweder durch Analyse von Messwerten experimentell abgeleitet oder durch eine Modellkalibrierung geschätzt werden (siehe Kap. 2.3).

In dieser Arbeit wird zur Vereinfachung auf die Darstellung der Zeitabhängigkeit des Systems in den Formeln verzichtet, da die Untersuchungen sich ausschließlich auf die Analyse von Modellparametern ( $X$ ) konzentriert, die für die Dauer der Modellsimulation konstant sind. Die Betrachtung zeitabhängiger Modellinputs wie z.B. der Einfluss der mittleren Lufttemperatur auf das Modellergebnis ist nicht Bestandteil dieser Arbeit. Aus diesem Grund wird in den weiteren Formeln die Notation  $(t)$  weggelassen. Daraus folgt die allgemeine Beschreibung eines Modells durch

$$Y = f [ V, Z, X ]. \quad (2.5)$$

### 2.1.2 Modelleigenschaften

Die Modellstruktur wird durch die zu analysierende Fragestellung, der erforderlichen Genauigkeit der Ergebnisse, den verfügbaren System- und Eingangsdaten sowie dem möglichen Bearbeitungsaufwand beeinflusst. In der Ökosystemmodellierung wird zwischen prozessorientierten und statistischen Modellen unterschieden. Bei der Entwicklung von prozessorientierten Modellen werden anhand von Feldversuchen einzelne Prozesse und Prozessgrößen des Ökosystems sowie deren Zusammenhänge analysiert und durch die mathematische Abbildungen im Modell beschrieben. Statistische Modelle leiten Zusammenhänge des Ökosystems aus Messdaten ab, ohne die unterliegenden Prozesse zu beschreiben.

Bei der Modellentwicklung werden Modellstruktur und Zusammenhänge zwischen Eingangs- und Ausgangsvariablen durch die Wahl der mathematischen Beschreibungsform eines Prozesses beeinflusst. Modelleigenschaften wie Linearität, Additivität und Monotonie spielen bei der Durchführung von Sensitivitätsanalysen eine wichtige Rolle, da die Anwendung einzelner Verfahren bestimmte Modelleigenschaften voraussetzen. Im Folgenden werden die zuvor genannten Modelleigenschaften kurz erläutert.

### Linearität

Die Linearität eines Modells bezieht sich auf die Eigenschaften der Modellgleichungen und die Linearität in den Parametern. Lineare Modelle können analytisch gelöst werden, während bei nicht-linearen Modellen numerische Techniken zur Lösung der Modellgleichungen angewendet werden.

Ein lineares Modell wird durch

$$y = x_0 + \sum_{i=1}^n x_i \cdot v_i \quad (2.6)$$

beschrieben, mit  $y$  als ein Modelloutput,  $n$  die Anzahl der Modellparameter  $X$  mit  $X = [x_1, \dots, x_n]$  und  $V$  als Vektor der Modellinputs mit  $V = [v_1, \dots, v_m]$ . Oft werden lineare Ansätze aus Effizienzgründen zur Vereinfachung von nichtlinearen Prozessen eingesetzt.

### Additivität

Bei einem additiven Modell lässt sich der Output  $y$  als Summe der Abhängigkeiten von den Eingangsgrößen  $V$  darstellen. Der Output eines additiven Modells berechnet sich durch

$$y = f(v_1, \dots, v_m) = \sum_{i=1}^m f_i(v_i) \quad (2.7)$$

mit  $y$  als Modelloutput und  $m$  als Anzahl der Modellvariablen  $v_i$ . Lineare Modelle weisen additive Eigenschaften auf, da sie eine Spezialform der additiven Modelle sind (Schwieger 2005).

### Monotonie

Ein Modell ist monoton, wenn für eine monoton wachsende oder fallende Folge von Modellinputs ( $V = (v_1, v_2, \dots, v_m)$ ) auch die realisierende Folge der Modelloutputs ( $f(V)$ ) monoton wachsend bzw. fallend ist. Dabei ist  $f(V)$

$$\begin{aligned} \text{monoton steigend, wenn } v'_k > v_k \quad &\text{und} \quad f(v_1, \dots, v'_k, \dots, v_m) > f(v_1, \dots, v_k, \dots, v_m) \\ &\text{und} \\ \text{monoton fallend, wenn } v'_k < v_k \quad &\text{und} \quad f(v_1, \dots, v'_k, \dots, v_m) < f(v_1, \dots, v_k, \dots, v_m). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Eine ausführliche Definition monotoner Modelle ist in Schwieger (2005) nachzulesen.

## 2.2 Sensitivitätsanalyse

Die Sensitivitätsanalyse (SA) hat sich als ein zentrales Instrument zur Analyse und Validierung von Modellen etabliert. Sie ist definiert als Untersuchung der Empfindlichkeit von Modelloutputs bei Variation von Modellfaktoren (Saltelli et al. 2000). Oft werden dabei die Parameter eines Modells variiert und die resultierenden Änderungen der Ausgangsgrößen untersucht. In der Literatur werden im Bereich der SA sowohl Modellinputs ( $V$ ) als auch Parameter ( $X$ ) unter dem einheitlichen Begriff *Faktoren* zusammengefasst (Saltelli et al. 2000). Der Fokus der Arbeit besteht in der Untersuchung des Einflusses von Modellparameter auf die jeweiligen Modelloutputs. Aus diesem Grund werden verschiedene SA-Verfahren beispielhaft für die Untersuchung von Modellparametern erläutert.

Die SA besitzt gemäß Saltelli et al. (2000), Wallach et al. (2006) und Campolonga and Saltelli (1997) verschiedene Zielstellungen wie die

- Validierung des zu erwartenden Modellverhaltens bei Änderungen von Parametern,
- Identifikation wichtiger Modellparameter, die während der Modellkalibrierung angepasst werden,
- Identifikation wichtiger Modellparameter, für die eine präzisere Schätzung bzw. Messung erforderlich ist,
- Identifikation von Modelleigenschaften wie z. B. von linearen, nichtlinearen oder additiven Zusammenhängen zwischen Eingangs- und Ausgangsgrößen oder
- Reduktion der Modellkomplexität durch Identifikation von Modellparametern, die keinen Einfluss auf den Modelloutput besitzen.

SA sind in der Lage, Interaktionen zwischen Modellparametern zu identifizieren. Weiterhin sind sie ein wichtiger Bestandteil der Modellentwicklung und tragen wesentlich zur Validierung eines Modells und zum Verständnis des Modellverhaltens bei.

### 2.2.1 Verfahren der Sensitivitätsanalyse

In der Literatur werden zahlreiche Methoden zur SA aufgezählt, wobei zwischen qualitativen und quantitativen SA-Verfahren unterschieden wird (Saltelli et al. 2000). Qualitative Verfahren, auch Screening-Methoden genannt, erstellen qualitative Aussagen zur Sensitivität in Form einer Parameterpriorisierung. Sie werden bei der Analyse komplexer Modelle eingesetzt, wenn viele Eingangsgrößen zu berücksichtigen sind und der Einsatz quantitativer Verfahren aufgrund des hohen Rechenaufwands nicht möglich ist. Im Gegensatz zu den qualitativen Verfahren wird die Sensitivität bei quantitativen Verfahren als reelle Zahl ausgedrückt.

Saltelli et al. (2000) stellen eine weitere Klassifizierung von SA-Verfahren vor, wobei sie zwischen lokalen und globalen Verfahren unterscheiden. Lokale SA-Verfahren konzentrieren sich auf die Analyse eines Parameters an einem bestimmten Punkt. Es wird nur ein Modellparameter variiert, während alle weiteren Parameter konstant bleiben. Die Bewertungsmaße lokaler SA basieren auf der Berechnung von partiellen Ableitungen. Mathematische Grundlagen der lokalen SA wurden in Cacuci (1981a) und Cacuci (1981b) im Rahmen der Nuklearforschung vorgestellt. Lokale SA-Verfahren besitzen den Nachteil, dass die Analyse von Interaktionen zwischen Parametern nicht möglich ist. Aussagen zum Modellverhalten sind außerdem nur für das untersuchte Intervall um den Wert möglich, für den partielle Ableitungen gebildet wurden.

In der Ökosystemforschung spielt die Untersuchung der Wechselwirkungen zwischen Parametern eine große Rolle. Weiterhin ist die Anforderung der Stetigkeit lokaler SA-Verfahren bei dynamischen Ökosystemmodellen im Allgemeinen nicht erfüllt. Aus diesem Grund sind lokale SA für die Untersuchungen des MONICA-Modells nicht geeignet. Für die Identifikation der relevanten Modellparameter von MONICA werden deshalb ausschließlich globale SA-Verfahren eingesetzt. Globale Verfahren schränken den zu untersuchenden Wertebereich der Parameter nicht ein. Die Sensitivitätsmaße globaler SA werden unter Berücksichtigung des gesamten Wertebereichs der Eingangs- und Ausgangsgrößen berechnet. Durch Evaluierungen von Parameter-Samples, die basierend auf einer vorgegebenen Verteilungs- oder Suchfunktion erzeugt werden, werden Änderun-

gen an den Modelloutputs untersucht. Charakteristisch für globale SA ist die gleichzeitige Variation mehrerer Parameter. Dadurch sind globale Verfahren in der Lage, Interaktionen und nichtlineare Zusammenhänge zu identifizieren. Da eine große Anzahl von Modellevaluierungen für verschiedene Parameterbelegungen durchgeführt werden, sind globale SA im Vergleich zu lokalen SA rechenaufwendiger. Die Anwendung globaler SA-Verfahren hat in den letzten Jahren aufgrund der ständig steigenden Rechenleistung zunehmend an Bedeutung gewonnen. Cacuci (1981a), Helton (1993), Saltelli et al. (2000) und Saltelli (2008) geben eine Übersicht verschiedener, globaler SA-Verfahren. In Saltelli et al. (2000) wird eine Gruppierung globaler SA-Verfahren in Screening-, Sampling- und Varianzbasierte Methoden unterteilt vorgestellt. Ausgewählte, repräsentative Verfahren dieser SA-Gruppen werden im Folgenden kurz vorgestellt.

### Screening-Verfahren

Screening-Verfahren untersuchen den qualitativen Einfluss von Eingangsgrößen auf Modellausgangsgrößen. Charakteristisch für diese Verfahren ist die geringe Anzahl an notwendigen Modellevaluierungen zur Erstellung eines Parameter-Rankings. Es werden dabei Parameter mit hohem Einfluss auf den Modelloutput identifiziert. Oft werden Screening-Verfahren als Voruntersuchung eingesetzt, um den Aufwand von quantitativen Verfahren – durch Einschränkung der zu untersuchenden Parameter – zu reduzieren (Confalonieri et al. 2010b). Zu den Screening-Methoden zählen verschiedene 'one-at-a-time' (OAT) - Experimente (Daniel 1973) sowie die Morris-Methode (Morris 1991). Eine ausführliche Beschreibung der Morris-Methode befindet sich in Kapitel 4.2.1. Sobol' and Kucherenko (2010) stellen mit dem *derivative-based global sensitivity measure* (DGSM) eine alternative Screening Methode zur Morris-Methode vor. In Saltelli et al. (2000) werden weitere Screening-Verfahren vorgestellt.

### Sampling-basierte Verfahren

Diese Verfahren, auch Monte Carlo-Verfahren genannt, basieren auf der Berechnung von Sensitivitätsmaßen nach Durchführung von Modellevaluierungen für verschiedene Parameterwerte (Samples). Im Allgemeinen bestehen diese Verfahren aus folgenden Schritten (Saltelli et al. 2000):

- **Festlegung des Wertebereichs und Verteilungsfunktion der Parameter**

Die Festlegung des Wertebereichs und der Verteilungsfunktion der Parameter ist ein wichtiger Schritt in der SA, da die Definition des Wertebereichs als auch die Festlegung der Verteilungsfunktion der Parameter einen wesentlichen Einfluss auf das Ergebnis der SA haben. Wird der Wertebereich der Parameter zu klein gewählt, besteht die Gefahr, dass sensitive Parameterwerte nicht im untersuchten Bereich liegen. Auch die Wahl der Verteilungsfunktion beeinflusst das SA-Ergebnis. In der Ökosystemmodellierung ist dieser Schritt einer SA besonders schwierig, da oft detaillierte Kenntnisse über die Verteilungsform der Parameter fehlen.

- **Erzeugung der Samples**

In diesem Schritt werden auf Basis der Festlegungen des vorherigen Schrittes  $N$  Parameter-Samples ( $N = 1, \dots, k$ ) mit Hilfe einer Sampling-Strategie erzeugt. In der Literatur werden verschiedene Sampling-Strategien wie Random-Sampling (Karanki et al. 2009) oder das effizientere Latin-Hypercube-Sampling (McKay et al. 1979; Saltelli et al. 2000; Janssen 2013) beschrieben, die für sampling-basierte SA-Verfahren eingesetzt werden können.

- **Durchführung von Modellevaluierungen**

Für jedes erzeugte Parameter-Sample wird eine Modellsimulation durchgeführt. In Abhängigkeit von der Ausführungszeit einer Modellsimulation ist dies der rechenaufwendigste Schritt.

- **Berechnung der Sensitivitätsmaße**

Ausgehend von den Ergebnissen der Modellevaluierungen wird in diesem Schritt die Verteilung der Modelloutputs untersucht. Durch Berechnung regressions- oder korrelationsbasierter Sensitivitätsmaße kann der Einfluss der Modellparameter quantifiziert werden (Manache and Melching 2008).

Verschiedene Sensitivitätsmaße können zur Auswertung der Ergebnisse der Modellevaluierungen verwendet werden. In Saltelli et al. (2000), Manache and Melching (2008) und Helton (1993) werden verschiedene Maße vorgestellt und miteinander verglichen. Viele Verfahren berechnen basierend auf Regressions- und Korrelationsanalysen (Förster and Rönz 1979) Koeffizienten zur Quantifizierung des Einflusses der Modellparameter. Die Qualität dieser Sensitivitätsmaße ist jedoch abhängig von der Linearität des untersuchten Modells, da diese Koeffizienten nahezu lineare bzw. monotone Abhängigkeiten zwischen Modellparametern und -outputs voraussetzen. Im Folgenden werden die am häufigsten eingesetzten Sensitivitätsmaße Monte Carlo-basierter SA vorgestellt.

#### **Linearer Korrelationskoeffizient (LCC)**

Der LCC zählt zu den einfachsten und häufig eingesetzten Sensitivitätsmaßen. Er beschreibt die lineare Abhängigkeit des Modelloutputs  $y$  vom Modellparameter  $x_i$  durch Berechnung der Korrelation (Förster and Rönz 1979). Der LCC berechnet sich aus

$$LCC_i = r_{y x_i} = \frac{cov(y, x_i)}{\sqrt{var(y) var(x_i)}} = \frac{\sum_{k=1}^N (x_{ki} - \bar{x}_i) \cdot (y_k - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{k=1}^N (x_{ki} - \bar{x}_i)^2 \cdot \sum_{k=1}^N (y_k - \bar{y})^2}} \quad (2.9)$$

mit  $x_i$  als  $i$ -ter Modellparameter,  $y$  als Modelloutput,  $cov(y, x_i)$  als Kovarianz von  $y$  und  $x_i$ ,  $var(y)$  als Varianz von  $y$  und  $var(x_i)$  als Varianz von  $x_i$ .  $x_{ki}$  und  $y_k$  sind die Werte des Modellparameters  $x_i$  und des Modelloutputs  $y$  während des  $k$ ten Simulationslaufs.  $\bar{x}_i$  und  $\bar{y}$  sind die Mittelwerte von  $(x_{1i}, \dots, x_{Ni})$  bzw.  $(y_1, \dots, y_N)$ .

Der LCC beschreibt den Grad der linearen Abhängigkeit von  $x_i$  und  $y$ , unter Berücksichtigung des Einflusses anderer Modellparameter, die mit  $x_i$  korrelieren. Der LCC variiert zwischen  $-1$  und  $1$  wobei ein Wert nahe  $-1$  oder  $1$  auf eine hohe lineare Abhängigkeit respektive auf einen Modellparameter mit hohem Einfluss weist.

#### **Partieller Korrelationskoeffizient (PCC)**

Existieren Parameterinteraktionen, so beschreibt der LCC nicht nur den Einfluss des untersuchten Parameters  $x_i$  sondern auch den Einfluss aller mit  $x_i$  interagierenden Parameter. Iman and Helton (1988) stellen einen weiteren Korrelationskoeffizienten, den PCC, vor, der den linearen Einfluss von  $x_i$  auf  $y$  unter Ausschluss der linearen Effekte der anderen Parameter beschreibt. Der Einfluss der mit  $x_i$  korrelierten Parameter wird dabei entfernt. Der PCC eines Parameters  $x_i$  berechnet sich



laut Manache and Melching (2008) wie folgt:

$$PCC_i = \frac{c_{iy}}{\sqrt{c_{ii}c_{yy}}} \quad (2.10)$$

mit  $c_{iy}$ ,  $c_{ii}$ , und  $c_{yy}$  als Elemente der inversen Korrelationsmatrix  $C$ . Die inverse Korrelationsmatrix  $C$  berechnet sich wie folgt:

$$C = \begin{bmatrix} r_{x_1x_1} & r_{x_1x_2} & \dots & r_{x_1x_p} & r_{x_1x_y} \\ r_{x_2x_1} & r_{x_2x_2} & \dots & r_{x_2x_p} & r_{x_2x_y} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ r_{x_px_1} & r_{x_px_2} & \dots & r_{x_px_p} & r_{x_px_y} \\ r_{yx_1} & r_{yx_2} & \dots & r_{yx_p} & r_{yx_y} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1p} & c_{1y} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2p} & c_{2y} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{p1} & c_{p2} & \dots & c_{pp} & c_{py} \\ c_{y1} & c_{y2} & \dots & c_{yp} & c_{yy} \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

mit  $r_{x_ix_j}$  als Korrelationskoeffizient zwischen den Modellparametern  $x_i$  und  $x_j$  und  $r_{x_iy}$  als Korrelationskoeffizient zwischen  $x_i$  und dem Modelloutput  $y$  (siehe LCC).

Da beim PCC der Modelloutput  $y$  für jeden individuellen Parameter  $x_i$  korrigiert wird, somit für jede Variable ein unterschiedlicher Output zu Grunde liegt, sind Vergleiche der Sensitivität zwischen verschiedenen Modellparametern nur bedingt möglich.

#### Semi-partieller Korrelationskoeffizient (SPC)

Janssen et al. (1990) stellen mit dem SPC einen alternativen Sensitivitätsindex zum PCC vor, der Vergleiche zwischen verschiedenen Parametern ermöglicht. Beim SPC wird ausschließlich der Parameter  $x_i$  korrigiert, wobei die Korrelation des korrigierten Parameters  $\tilde{x}_i$  mit  $y$  berechnet wird. Der SPC ist ein Maß für den linearen Zusammenhang des korrigierten Parameters  $\tilde{x}_i$  und dem Output  $y$  (Manache and Melching 2008) mit

$$SPC_i = r_{y\tilde{x}_i}. \quad (2.12)$$

#### Regressionskoeffizient (RC)

Die lineare Regressionsanalyse bietet Möglichkeiten zur Berechnung weiterer Sensitivitätsmaße. Da die Regressionsanalyse nicht im Fokus dieser Arbeit steht, wird diese nur am Rande zum besseren Verständnis der Herleitung des Sensitivitätsmaßes beschrieben. Eine genau Beschreibung der Regressionsanalyse ist u.a. in Sachs and Hedderich (2009) zu finden.

Die zu schätzenden Regressionskoeffizienten  $b_i$  eines Regressionsmodells  $y$

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i \quad (2.13)$$

$$b_i = \frac{\Delta y}{\Delta x_i} \quad (2.14)$$

mit  $n$  als Anzahl der untersuchten Modellparameter, werden bei der Berechnung des RC zur Quantifizierung des Einflusses der Modellparameter  $x_i$  herangezogen. Die Regressionskoeffizienten  $b_i$

sind dabei ein absolutes Sensitivitätsmaß, welches die Änderung des Outputs  $y$  um  $\Delta y$  bei Änderung des Parameters  $x_i$  um  $\Delta x_i$  beschreibt, sofern alle anderen Parameter  $x_j$  konstant bleiben.

$$RC_i = b_i = \frac{\Delta y}{\Delta x_i} \quad x_j = \text{konstant} \quad (2.15)$$

Die Aussage des RCs ist nur dann zulässig, wenn ein linearer Zusammenhang zwischen Input und Output besteht. Das Bestimmtheitsmaß  $R^2$  gibt dabei an, wie gut das Regressionsmodell die linearen Zusammenhänge der Modellparameter und des Outputs beschreibt. Ein  $R^2$  von 1 deutet auf eine perfekte Modellübereinstimmung hin. Saltelli et al. (2006) weisen darauf hin, dass die Verwendung von Regressionskoeffizienten als Sensitivitätsmaß nur bei einem  $R^2 > 0.7$  geeignet ist.

Ein Nachteil der RCs ist, dass die Regressionskoeffizienten verschiedener Modellparameter nicht miteinander verglichen werden können, wenn die Modellparameter unterschiedliche Wertebereiche besitzen. Aus diesem Grund empfehlen Saltelli et al. (2000) bzw. Manache and Melching (2008) die Standardisierung des RCs.

### Standardisierter Regressionskoeffizient (SRC)

Durch die Standardisierung der Regressionskoeffizienten wird das Problem der Unvergleichbarkeit von Regressionskoeffizienten bei Parametern mit verschiedenen Wertebereichen gelöst. Sie werden durch

$$SRC_i = RC_i \cdot \frac{S_{x_i}}{S_y} \quad (2.16)$$

berechnet, mit  $RC_i$  als Regressionskoeffizienten des  $i$ -ten Modellparameters  $x_i$ ,  $S_{x_i}$  als Standardabweichung von  $x_i$  mit  $x_i = (x_{1i}, \dots, x_{Ni})$  und  $S_y$  als Standardabweichung des Modelloutputs  $y$  mit  $y = (y_1, \dots, y_N)$ .

Die standardisierten Regressionskoeffizienten sind ein relatives Sensitivitätsmaß. Sie geben an, um wie viel sich der Modelloutput im Verhältnis zu seiner Standardabweichung verändert, wenn ein Modellparameter um eine Standardabweichung verändert wird (Draper and Smith 1981; Manache and Melching 2008).

SRCs werden häufig zur Erstellung eines Parameter-Rankings eingesetzt (Sin et al. 2011; Estrada and Diaz 2010; Sin et al. 2009). Die SRC wie auch die RCs setzen lineare Abhängigkeiten zwischen Modellparametern und Output voraus. Iman and Conover (1979) empfehlen beim Vorhandensein nichtlinearer Zusammenhänge die Berechnung der Regressionskoeffizienten auf Basis von rangtransformierten Daten.

### Rangtransformierte Koeffizienten

Die in den vorherigen Abschnitten beschriebenen Koeffizienten LCC, PCC, SPC, RC und SRC sind für die Analyse linearer Modell ( $R^2 \approx 1$ ) geeignet. Je geringer  $R^2$ , desto weniger aussagekräftig sind die Aussagen der Koeffizienten. Zur Verwendung dieser Maße auch bei nichtlinearen Zusammenhängen wurden rangbasierte Maße entwickelt, die auf der Reihenfolge der Realisierungen – dem Rang  $R(x_i)$  – basieren. Der kleinste Wert eines Parameters  $x_{i/min}$  erhält den Wert  $R(x_{i/min}) = 1$ , der zweitkleinste den Wert  $R(x_{i/min2}) = 2$ , etc.

Die Rangtransformation ist auf beliebige nichtlineare, monotone Modelle anwendbar. Durch die Rangtransformation wird eine Linearisierung des Modells erzwungen. Iman and Conover (1979) berechnen verschiedene lineare Sensitivitätsmaße auf der Basis von rangtransformierten Daten. Die Daten werden dabei durch ihre jeweiligen Ränge ersetzt und die Korrelation bzw. lineare Regression für die rangtransformierten Daten berechnet. Die Aussage der linearen und rangtransformierten Sensitivitätsmaße bleibt bei der Analyse linearer Modelle unverändert. Wird jedoch ein nichtlineares Modell betrachtet, so verbessert die Rangtransformation die Ergebnisse. Das Bestimmtheitsmaß erhöht sich dabei bei den rangtransformierten Koeffizienten für nichtlineare Modelle.

Saltelli and Sobol' (1995) untersuchen Vor- und Nachteile bei Verwendung von rangtransformierten Daten für die Berechnung von korrelations- und regressionsbasierten Sensitivitätsindizes. Sie zeigen, dass die Rangtransformation sich besonders bei nichtlinearen Modellen eignet, wobei allerdings die Effekte der Rangtransformation bei der Interpretation der Sensitivitätsindizes zu berücksichtigen sind. Die Ergebnisse dürfen nicht als eine funktionale Beschreibung zwischen Eingangs- und Ausgangsgrößen missinterpretiert werden (Iman and Conover 1979), sondern dienen nur dem Erkennen sensibler Eingangsgrößen. Saltelli and Sobol' (1995) zeigen, dass durch die Rangtransformation eine Linearisierung des Modells erzwungen wird, wodurch evtl. höhere Haupteffekte berechnet werden. Parameter, die sich durch einen hohen Totaleffekt auszeichnen, d.h. stark mit anderen Parametern interagieren, können bei der rangtransformierten Analyse übersehen werden. Saltelli et al. (1993) zeigen, dass die Rangtransformation bei nicht-monotonen Modellen nicht eingesetzt werden kann.

#### **Alternative Anwendung der Regressionsanalyse**

Die Regressionsanalyse kann neben der Berechnung der RCs oder SRCs zur Identifizierung wichtiger Modellparameter eingesetzt werden. Dabei wird mit Hilfe eines Regressionsmodells abgeschätzt, welche Modellparameter einen Einfluss auf den Output haben. Nach Niemeier (2008) wird dabei von einem Modell mit maximaler Koeffizientenanzahl ausgegangen. Die Signifikanz einzelner Regressionskoeffizienten oder Koeffizientengruppen werden mittels t- bzw. F-Tests überprüft, so dass die Anzahl der Modellparameter schrittweise reduziert werden kann.

#### **Varianzbasierte Verfahren**

Varianzbasierte Verfahren werden bei der Analyse von nichtlinearen Modell eingesetzt. Sie setzen keine speziellen Modelleigenschaften wie Linearität, Additivität oder Monotonie voraus, wodurch sie modellunabhängig sind. Charakteristisch für diese Verfahren ist die Zerlegung der Varianz des Outputs in Abhängigkeit von der Varianz der Modellparameter (ANOVA). Varianzbasierte Verfahren gehören zu einer Untergruppe der Sampling-basierten Verfahren. Sie sind, wie auch die zuvor vorgestellten Monte Carlo-Verfahren, sehr rechenaufwendig.

Varianzbasierte Sensitivitätsmaße wurden bereits in den 70er Jahren von Cukier et al. (1973) vorgestellt. An Bedeutung gewannen sie jedoch erst durch Untersuchungen des russischen Mathematikers I. M. Sobol', der eine verallgemeinerte mathematische Beschreibung vorstellte (Sobol' 1993). Im Folgenden werden die grundlegenden Eigenschaften und Zusammenhänge varianzbasierter Verfahren kurz vorgestellt. Details und weiterführende Beschreibungen können in Saltelli et al. (2000) und Saltelli (2008) nachgelesen werden.

Die Varianz des Outputs  $V(y)$  wird durch die Varianz der Modellparameter  $X$  mit  $X = [x_1, \dots, x_n]$

verursacht. Die Identifikation des Modellparameters mit dem höchsten Einfluss erfolgt durch Bestimmung des Parameters  $x_i$ , der zur größten Reduktion der Varianz des Outputs führt. Dazu müsste der wahre Wert des Parameters bekannt sein, so dass der Parameter auf diesen Wert fixiert werden kann (Saltelli et al. 2000). Da dies nicht der Fall ist, wird der wahre Wert des Parameters durch Bildung von Parameter-Samples auf Basis einer vorgegebenen Verteilung approximiert. Die reduzierte Varianz des Modelloutputs bei Mittlung der Parameter-Samples von  $x_i$  lässt sich nach Saltelli et al. (2000) durch

$$E[V(y|x_i)] \quad (2.17)$$

beschreiben.

Nach Saltelli et al. (2000) setzt sich die Gesamtvarianz  $V(y)$  eines Modelloutputs  $y$  aus den zwei Termen

$$V(y) = V[E(y|x_i)] + E[V(y|x_i)] \quad (2.18)$$

zusammen.  $V[E(y|x_i)]$  beschreibt die Unsicherheit im Modelloutput, die durch  $x_i$  verursacht wird.  $E[V(y|x_i)]$  ist die erwartete reduzierte Varianz, welche die Unsicherheiten enthält, die nicht auf  $x_i$  zurückzuführen sind.

In der varianzbasierten Sensitivitätsanalyse werden zwei Sensitivitätsindizes namens *Haupteffekt* und *Totaleffekt* berechnet (Saltelli et al. 2000). Der Haupteffekt  $S_i$  ist ein Maß für den direkten Einfluss eines Parameters auf die Outputvarianz und berechnet sich wie folgt (Saltelli et al. 2000):

$$S_i = \frac{V[E(y|x_i)]}{V(y)}. \quad (2.19)$$

Der Totaleffekt  $T_i$  berücksichtigt zusätzlich zum Haupteffekt Wechselwirkungseffekte der Modellparameter. Er wird durch

$$S_{T_i} = 1 - \frac{V[E(y|x_{\sim i})]}{V(y)} \quad (2.20)$$

berechnet, wobei  $x_{\sim i}$  die Menge aller Parameter außer  $x_i$  darstellt (Saltelli et al. 2000).

### Sobol's Methode

Das Verfahren nach Sobol' basiert auf der Dekomposition der Outputvarianz in Varianzterme individueller Parameter. Im Folgenden werden die Grundlagen der originalen Sobol'-Methode vorgestellt. Für eine genaue Darstellung und Herleitung der Sensitivitätsindizes wird auf Sobol' (1993) oder Saltelli et al. (2000) verwiesen.

Die Modellfunktion  $f(X)$  wird dabei in einzelne Summanden mit steigender Dimensionalität zerlegt, mit:

$$f(x_1, \dots, x_n) = f_0 + \sum_{i=1}^n f_i(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} f_{ij}(x_i, x_j) + \dots + f_{1,2,\dots,n}(x_1, \dots, x_n) \quad (2.21)$$

wobei  $f_0$  eine Konstante ist. Die Outputvarianz  $D$  kann dadurch folgendermaßen zerlegt werden:

$$D = \sum_{i=1}^n D_i + \sum_{1 \leq i < j \leq n} D_{ij} + \dots + D_{1,2,\dots,n} \quad (2.22)$$

wobei  $D_i, D_{ij}, D_{1,2,\dots,n}$  die Varianz von  $f_i, f_{ij}, f_{1,2,\dots,n}$  repräsentieren. Die Sensitivitätsmaße  $S_{1,\dots,i_s}$  berechnen sich aus

$$S_{1,\dots,i_s} = \frac{D_{i_1,\dots,i_s}}{D} \quad \text{mit } 1 \leq i_1 < \dots < i_s \leq n \quad (2.23)$$

wobei  $S_i$  als Sensitivitätsmaß erster Ordnung bezeichnet wird, welches den Haupteffekt von  $x_i$  auf  $y$  angibt.  $S_{ij}$  mit  $i \neq j$  wird als Sensitivitätsmaß zweiter Ordnung bezeichnet, das den Interaktionseffekt von  $x_i$  und  $x_j$  quantifiziert (Saltelli et al. 2000).

### Extended FAST

Der Fourier Amplitude Sensitivity Test (FAST) wurde erstmalig in den 70er Jahren von Cukier et al. (1973, 1975) vorgestellt. Charakteristisch für diese Methode ist die Auswertung der Sensitivität im Frequenzbereich. Jedem Modellparameter wird eine individuelle, ganzzahlige Frequenz  $\omega_i$  zugewiesen. Die Stichproben zur Abtastung des Parameterwertebereiches werden über eine periodische Suchfunktion erzeugt. In Saltelli et al. (2000) werden verschiedene Suchfunktionen vorgestellt.

Die von Cukier et al. (1973) vorgestellte Methode erlaubte zunächst nur die Berechnung des Haupteffektes von Parametern. Saltelli et al. (1999) jedoch stellten eine Weiterentwicklung namens *Extended FAST* vor, die auch die Bestimmung des Totaleffekts ermöglicht. Saltelli and Bolado (1998) weisen nach, dass die Extended FAST-Methode identische Ergebnisse zu den Sobol' Effekten 1. Ordnung und dem Totaleffekt liefert, allerdings ein besseres Konvergenzverhalten aufzeigt. Eine detaillierte Beschreibung der Extended FAST befindet sich in Kapitel 4.2.2.

### Random Balance Design - FAST

Das Random Balanced Design-FAST (RBD-FAST) basiert auf der Anwendung des Satterthwaite's Random Balanced Design (Satterthwaite 1959). Das Verfahren wurde von Tarantola et al. (2006) vorgestellt und baut – wie die Extended FAST – auf der spektralen Analyse der Outputvarianz auf. Im Vergleich zur Extended FAST ist das RBD-FAST effizienter, da weniger Modellsimulationen erforderlich sind. Allerdings ist nach Tarantola et al. (2006) nur die Berechnung des Haupteffekts möglich.

Wie bei der Extended FAST werden die Parameter-Samples durch eine Suchfunktion erzeugt. Allerdings wird für jeden Parameter dieselbe Frequenz  $\omega_i = 1$  verwendet. Auf diese Weise wird jedoch der Parameterwertebereich nicht vollständig abgetastet. Deshalb werden zufällige Permutationen der erzeugten Parameter-Samples erzeugt. Nach der Evaluierung jedes Samples werden die Simulationsergebnisse zur Berechnung des Haupteffekts in Bezug zum untersuchten Parameter  $x_i$  aufsteigend sortiert. Abschließend wird wie bei der Extended FAST eine Fourier-Analyse zur Berechnung der Haupteffekte durchgeführt. Der Rechenaufwand der RBD-FAST beträgt  $\mathcal{O}(N)$ .

In Mara (2009) wird eine Erweiterung der RBD-FAST vorgestellt, die auch die Berechnung von Totaleffekten ermöglicht. Dabei wird  $x_i$  zufällig erzeugt, wobei alle anderen Parameter  $x_{\sim i}$  mit kleinen Frequenzen  $\omega_{\sim i} = \{1, 2, 3, \dots, k\}$  periodisch erzeugt werden. Hohe Werte im niedrigen

Frequenzspektrum werden allein durch  $x_{\sim i}$  verursacht, während ausschließlich  $x_i$  sowie die Interaktionen von  $x_i$  mit  $x_{\sim i}$  für Ausschläge im hohen Frequenzbereich verantwortlich sind. Auf Basis dieser Informationen kann durch Auswertung des Frequenzspektrums der Totaleffekt berechnet werden.

### 2.2.2 Anwendungen in der Ökosystemmodellierung

In der Ökosystemmodellierung werden trotz des hohen Rechenaufwands verstärkt varianzbasierte Verfahren eingesetzt (Wu et al. 2012; López-Cruz et al. 2012), da sie keine Bedingungen an das Modellverhalten stellen und unabhängig vom Modell eingesetzt werden können. Oftmals wird zunächst eine qualitative Analyse der Parameter mit Hilfe einer Screening-Methode durchgeführt, bevor die Parametersensitivität durch Berechnung der Haupt- oder Totaleffekte quantifiziert wird (Confalonieri et al. 2010b; Francos et al. 2003). Die Kombination von qualitativen und varianzbasierten Verfahren wurde von Confalonieri et al. (2010b) empfohlen, die in einer Studie des Reis-Modells WARM (Confalonieri et al. 2009) die Morris-Methode mit den Sobol's Indizes verglichen haben. Sie zeigten, dass einfachere Methoden wie die von Morris eine gute Alternative zu aufwendigeren Methoden sind. Sie empfahlen, die Anzahl der Parameter eines komplexen Modells mittels einer Screening-Methode auf eine kleine, sensitive Grundmenge zu reduzieren und diese Parameter anschließend mit komplexeren, aufwendigeren SA-Verfahren zu untersuchen. Analog zu diesem Vorschlag stellten Francos et al. (2003) eine Methode zur Untersuchung eines komplexen, verteilten, hydrologischen Modells vor, in dem sie zunächst die einflussreichsten Modellparameter mittels der Morris-Methode identifizierten und anschließend die Sensitivität dieser Parameter durch die Berechnung des Haupteffekts, basierend auf den Ergebnissen der FAST, quantifizierten. Verschiedene Arbeiten konzentrieren sich auf den Vergleich verschiedener SA-Verfahren und deren Anwendung in der Ökosystemmodellierung. Viele Untersuchungen haben gezeigt, dass einfache Screening-Methoden wie die Morris-Methode ein ähnliches Ranking wie aufwendigere, varianzbasierte Verfahren erzielen (Confalonieri et al. 2010a; Drouet et al. 2011; Ciric et al. 2012; DeJonge et al. 2012). Confalonieri et al. (2010a) haben am Beispiel des Reis-Modells WARM (Confalonieri et al. 2009) die Morris-Methode, Monte Carlo-Sampling mit der Berechnung von regressionsbasierten Koeffizienten, die FAST- und Sobol'-Methode miteinander verglichen. Sie zeigten, dass zwar die varianzbasierten Methoden FAST und Sobol' die genauesten Ergebnisse erzielten, jedoch ein ähnliches Parameter-Ranking mit einfacheren, weniger aufwendigen Methoden realisiert werden konnte. Dieses Ergebnis wird durch die Untersuchungen von Ciric et al. (2012) und DeJonge et al. (2012) unterstützt, die die Morris-Methode mit der Extended FAST bzw. die Morris-Methode mit Sobol's Methode verglichen haben.

## 2.3 Modellkalibrierung und Parameteroptimierung

Ein wesentlicher Bestandteil der Modellentwicklung beinhaltet die Schätzung von Modellparametern  $X$  sowie die Evaluierung der Modells bezüglich seiner Vorhersagefähigkeit. Neben der Validierung und dem Vergleich eines Modells mit Messdaten sind Untersuchungen des Modellverhaltens von enormer Wichtigkeit.

Das Ziel der Modellkalibrierung ist die Schätzung der unbekannten Modellparameter, so dass eine bestmögliche Übereinstimmung von Mess- und Simulationswerten erreicht wird. Die Parameter-

schätzung oder auch Parameteroptimierung ist ein wesentlicher Schritt der Modellkalibrierung (Beven and Binley 1992; Janssen and Heuberger 1995; Wallach et al. 2006), bei der durch Variation der Modellparameter optimale Parameterwerte bezogen auf ein Gütekriterium ermittelt werden. Die Bewertung der Modellgüte kann visuell durch den Vergleich beobachteter und simulierter Werte oder aber durch die Berechnung von Gütekriterien (siehe Kapitel 4.4) erfolgen (Janssen and Heuberger 1995). Oft wird dabei ein Optimierungsansatz verfolgt, bei dem eine Kostenfunktion minimiert wird, die die Übereinstimmung von Mess- und Modellwerten quantifiziert (Janssen and Heuberger 1995; Wallach et al. 2006).

Im Gegensatz zur Modellkalibrierung erfolgt die Validierung an unabhängigen Datensätzen ohne Anpassung von Parametern. Mit Hilfe der Modellvalidierung wird nachgewiesen, dass das Modell auch für andere Eingangsdaten und Randbedingungen gute Simulationsergebnisse erzielt. Die Validierung erfolgt an Datensätzen, die nicht in der Kalibrierung eingesetzt wurden. Dabei wird häufig das Prinzip der *cross validation* eingesetzt (Arlot and Celisse 2010), bei dem die zur Verfügung stehenden Datensätze in mehrere Teildatensätze unterteilt werden. Es werden mehrere Parametrisierungsläufe durchgeführt, wobei jeweils unterschiedliche Kalibrierungs- und Validierungsdatensätze verwendet werden.

Prozessorientierte Ökosystemmodelle verwenden oftmals Differentialgleichungen, die häufig numerisch gelöst werden, zur Beschreibung des dynamischen Systemverhaltens. Oft weisen diese Modelle ein nichtlineares Verhalten auf und besitzen eine hohe Parameteranzahl. Im Allgemeinen stehen nur wenige Messwerte zur Kalibrierung prozessorientierter Modelle zur Verfügung. Diese Eigenschaften führen dazu, dass die Parameterschätzung ein schwierig zu lösendes Optimierungsproblem darstellt (Tremblay and Wallach 2004; Marsili-Libelli 1992).

In der Vergangenheit wurde oftmals eine manuelle Anpassung der Parameter vorgenommen, bei der die Modellentwickler durch ein *trial-and-error* Verfahren die Parameterwerte solange veränderten, bis eine zufriedenstellende Annäherung an ein Optimum erreicht wurde. Oft wurde dabei nur ein Parameter angepasst, so dass Interaktionen von Modellparametern ignoriert wurden. Die Bewertung der Modellgüte erfolgte meist visuell durch den Vergleich von Simulations- und Messwerten. Für komplexe Modelle mit einer hohen Parameteranzahl ist eine manuelle Parameteranpassung jedoch schwierig und mit hohem Zeitaufwand durchzuführen.

Durch die steigende Rechenleistung mit der Möglichkeit zur Parallelisierung von Berechnungen wurden jedoch zunehmend automatische Kalibrierungsverfahren eingesetzt. Die Übereinstimmung von Mess- und Simulationswerten wird dabei über statistische Gütemaße bewertet (Beven 2012). Viele Verfahren basieren auf einer Regressionsanalyse zur Schätzung der Modellparameter, jedoch ist eine Anwendung dieser Verfahren für Ökosystemmodelle aufgrund der zu hohen Parameteranzahl sowie der oft zu gering vorhandenen Messdaten nur eingeschränkt möglich (Wallach et al. 2006).

In der Ökosystemmodellierung wird grundsätzlich zwischen zwei Gruppen von automatischen Verfahren zur Parameterschätzung unterschieden, der klassischen Parameterschätzung und den Bayes'schen Ansätzen (Samaniego 2010).

### 2.3.1 Klassische Parameterschätzverfahren

Bei der klassischen Parameterschätzung wird ausgehend von einem definierten Punkt im Parameterraum nach einem besseren Parametersatz im Bezug auf die Zielfunktion gesucht. Der Ansatz ist

dabei, dass es nur eine wahre, optimale Parameterwertebelegung gibt. Zu den klassischen Parameterschätzverfahren zählen die Methode der kleinsten Quadrate sowie die Maximum Likelihood-Methode (ML, Beven 2012), die sich vor allem in der zu optimierenden Zielfunktion unterscheiden. Diese Ansätze haben den Nachteil, dass das Ergebnis der Kalibrierung stark vom Startwert abhängt und oft zur Identifikation lokaler Optima führt (Janssen and Heuberger 1995). Um das Konvergieren in ein lokales Optimum zu vermeiden, sollten die Parameterschätzungen mehrfach für verschiedene Startwerte durchgeführt werden.

Klassische Parameterschätzverfahren unterscheiden sich im Wesentlichen in der zu Grunde liegenden Optimierungsfunktion. Zur Lösung des Optimierungsproblems werden bekannte Optimierungsverfahren eingesetzt (Kapitel 2.3.3).

### Methode der kleinsten Quadrate

Die Methode der kleinsten Quadrate wird häufig zur Parameterschätzung eingesetzt (Wallach et al. 2006). Die Parameter werden durch Minimierung der Summe der gewichteten, quadratischen Abweichungen geschätzt. Die Schätzung wird durch Minimierung von  $W(X)$  hergeleitet, mit

$$W(X) = \sum_{j=1}^r [w_j \cdot (y_j - f(V; X))^2] \quad (2.24)$$

wobei  $r$  die Anzahl der Messungen,  $y_j$  ein Messwert,  $V$  ein Vektor der Modellinputs,  $w_j$  die Gewichte und  $X$  ein Vektor der zu schätzenden Modellparameter sind. Die Gewichte  $w_j$  werden eingesetzt, um Messwerte mit kleinerer Varianz höher zu wichten, so dass diese einen größeren Einfluss auf die Schätzung haben als Messwerte mit größerer Messunsicherheit. Eine genaue Beschreibung der Methode sowie dessen Verallgemeinerung für nichtlineare Modell ist in Seber and Wild (2003) zu finden.

### Maximum-Likelihood

Im Gegensatz zur Methode der kleinsten Quadrate muss bei der Maximum Likelihood (ML)-Methode die Dichtefunktion der Messwerte in Abhängigkeit von den unbekannten Parametern gegeben sein (Rice 2007).  $Y$  ist ein Vektor mit  $r$  Messwerten und  $Y = (y_1, y_2, \dots, y_r)$ .  $X$  sind die unbekannten Modellparameter und  $f(X)$  die von den Parametern abhängige Dichtefunktion von  $Y$ . Die Likelihoodfunktion  $L(y, X)$  ist definiert durch  $L(Y, X) = f(X)$ . Der optimale Parametersatz  $X$  ist der, für den der Likelihoodwert maximal wird. Zur Schätzung der Parameter  $X$  ist die Likelihoodfunktion zu maximieren. Dies kann durch die Anwendung verschiedener numerischer Optimierungsverfahren erfolgen. Beck and Arnold (1977) und Rice (2007) geben eine ausführliche Beschreibung und Herleitung des Verfahrens.

### 2.3.2 Bayes'sche Ansätze

Die Bayes'schen Ansätze behandeln die zu schätzenden Parameterwerte als Zufallsvariablen. Ausgehend von einer *a priori* definierten Wahrscheinlichkeitsfunktion der Parameter, die aus der Literatur oder dem vorhandenen Expertenwissen abgeleitet wird, wird eine neue Wahrscheinlichkeitsfunktion aus den Daten abgeleitet. Diese *Posteriori*-Wahrscheinlichkeitsfunktion wird durch Anwendung des Bayes-Theorem, einer Vorschrift zur Berechnung bedingter Wahrscheinlichkeiten, ermittelt (Sachs and Hedderich 2006). Anders als die klassischen Parameterschätzverfahren



akzeptieren die Bayes'schen Ansätze, dass verschiedene Parameterwerte zu optimalen Modellaussagen führen können. Dieses Konzept ist unter dem Begriff der Äquifinalität bekannt und wurde von Beven (1993); Beven and Freer (2001) vorgestellt.

Ein häufig eingesetztes Verfahren der Bayes'schen Ansätze ist die Generalised Likelihood Uncertainty Estimation (GLUE, Makowski et al. 2002, Li et al. 2010, Sreelash et al. 2012). Allerdings ist aufgrund der Monte Carlo-Simulation die Durchführung der GLUE mit hohem Rechenaufwand verbunden. Die Suche der optimalen Parameter wird gerade bei Modellen mit langen Ausführungszeiten erschwert. Durch die zunehmenden Möglichkeiten zur Parallelisierung von Berechnungen rückt dieses Problem jedoch mehr und mehr in den Hintergrund.

### Generalised Likelihood Uncertainty Estimation (GLUE)

Die GLUE-Methode wird sowohl zur Schätzung der Unsicherheit von Ökosystemmodellen eingesetzt (Hassan et al. 2008; Mannina 2011; Juston et al. 2010), als auch zur Schätzung unbekannter Modellparameter (Sreelash et al. 2012; Van Oijen et al. 2005; Mertens et al. 2004). Der GLUE-Ansatz wurde von Beven and Binley (1992) entwickelt und basiert auf den Grundzügen des Bayes-Theorem (Sachs and Hedderich 2006). Es wird dabei davon ausgegangen, dass nicht nur ein optimaler Parametersatz existiert, sondern dass es – innerhalb des Parameterwerterraums – mehrere Wertekombinationen gibt, die akzeptable Ergebnisse liefern (Beven and Freer 2001; Makowski et al. 2002). Beven and Binley (1992) gehen davon aus, dass für *überparametrisierte* Modelle die Schätzung eines einzigen, optimalen Parametersatzes nicht möglich ist.

Durch eine Monte Carlo-Analyse werden beliebig viele Werte der Modellparameter erzeugt. Für jedes Parameter-Sample wird eine Modellevaluierung durchgeführt und die simulierten und gemessenen Modelloutputs verglichen bzw. Modellgütemaße berechnet. Anhand eines zuvor definierten Schwellenwertes für das Gütemaß werden einzelne Parameter-Samples akzeptiert (*behavioural parameters*) bzw. verworfen (*non-behavioural parameters*). Die Wahl des Gütemaßes und des Schwellenwertes ist ein wichtiger Teil der GLUE-Methode (Li et al. 2010). Das Gütemaß sollte so gewählt werden, dass es die Evaluierung aller berücksichtigten Outputs beinhaltet. Die verworfenen Parameter-Samples werden in der weiteren Analyse nicht mehr berücksichtigt. Die akzeptierten Parameter-Samples werden gewichtet, wobei Samples mit höherem Gütemaß ein höheres und Samples mit niedrigem Gütemaß ein geringeres Gewicht erhalten. Das Gewicht, auch Likelihood genannt, repräsentiert die Güte eines Modells inklusive seiner Unsicherheiten, welche abhängig von der Modellstruktur, den beobachteten Werten und den Eingangsvariablen ist. Anschließend werden die Gewichte normiert, so dass ihre Summe eins entspricht. Die so erhaltene kumulative Summenverteilungsfunktion wird für die Ermittlung der deterministischen Parameterwerte durch Berechnung des Mittelwertes der Verteilung verwendet.

#### 2.3.3 Optimierungsverfahren

In der Modellkalibrierung werden Optimierungsverfahren einerseits zur Optimierung von Zielfunktionen, die z.B. bei der Methode der kleinsten Quadrate oder beim Maximum-Likelihood-Verfahren formuliert werden, eingesetzt. Andererseits werden Optimierungsverfahren zunehmend, als Alternative zu den bekannten Parameterschätzverfahren, direkt zur Identifikation optimaler Parameterbelegungen eingesetzt. Im Vergleich zu klassischen Parameterschätzverfahren können beim Einsatz von Optimierungsverfahren Randbedingungen formuliert werden. Randbedingun-

gen können dabei Restriktionen sein, die gewisse Parameterbelegungen verhindern, oder aber auch Abhängigkeiten und Zusammenhänge zwischen Parametern definieren. In der Ökosystemmodellierung ist die Formulierung von Randbedingungen bei der Schätzung von Modellparametern ein wichtiges Kriterium.

In der Literatur sind zahlreiche Optimierungsverfahren bekannt (Schwefel 1995). Im Folgenden werden ausgewählte Verfahren – direkte Suchverfahren, Simulated Annealing, Genetische Algorithmen und Evolutionsstrategien –, die vor allem in der Parameterschätzung eingesetzt werden (Beven 2012), kurz charakterisiert, wobei von einem zu maximierenden Optimierungsproblem ausgegangen wird.

### Direkte Suchverfahren

Direkte Suchverfahren suchen den Parameterraum schrittweise in unterschiedlichen Richtungen ab. Ausgehend von einem Startpunkt wird in einem iterativen Prozess der nächst bessere Punkt gesucht. So wird eine schrittweise Näherung an ein Optimum erreicht. Wie bereits zuvor bei den klassischen Parameterschätzverfahren erwähnt, neigen diese Verfahren dazu, in einem lokalen Optimum zu konvergieren. Aus diesem Grund ist die Realisierung multipler Optimierungsläufe mit unterschiedlichen Initialisierungen zwingend erforderlich.

Viele klassische *Hill Climbing*-Ansätze wie die *Gauß-Seidel-Strategie* (Ortega and Rockoff 1966), das *Simplex-Verfahren* (Nelder and Mead 1965) sowie die *Gradienten-Strategie* zählen zu den direkten Suchverfahren. Diese Verfahren orientieren sich am lokalen Anstieg und bewegen sich in Richtung des höchsten Anstiegs. Weiterhin zählen verschiedene *pattern search*-Verfahren (Hooke and Jeeves 1961; Kolda et al. 2003) zu den direkten Suchverfahren.

#### Gauß-Seidel-Strategie

Bei diesem Verfahren wird zunächst nur ein Parameter in eine Richtung verändert (Ortega and Rockoff 1966). Solange der Wert der Gütefunktion steigt bzw. der maximal zulässige Parameterwert nicht erreicht ist, wird der Parameter in diese Richtung verändert. Erst wenn der Wert der Gütefunktion sinkt, wird der Parameter nicht weiter verändert. Der Prozess wird nun einzeln für alle weiteren Parameter wiederholt, bis alle Parameter angepasst wurden.

#### Simplex-Verfahren

Die Suche beim Simplex-Verfahren (Nelder and Mead 1965) beginnt mit mehreren Startpunkten. In einem  $n$  - dimensionalen Raum werden  $n + 1$  Startpunkte verwendet. Im zweidimensionalen Raum wird somit ein Dreieck, im dreidimensionalen Raum ein Tetraeder erzeugt, etc. Nach der Erzeugung der Startpunkte werden diese zunächst evaluiert. Der Punkt mit dem schlechtesten Wert wird gestrichen. Allerdings wird ein neuer Punkt durch Spiegelung des gestrichenen Punktes am Mittelpunkt des verbliebenen  $n$ -Ecks erzeugt. Problematisch ist das Auftreten von Oszillationen, die dadurch entstehen, dass der neu erzeugte Punkt ebenfalls der schlechteste ist. Dadurch würde der eben gestrichene Punkt erneut erzeugt werden. Zur Vermeidung dieser Oszillationen kann der zweit-schlechteste Punkt zur Spiegelung verwendet werden. Nach einigen Iterationen werden so Polyeder erzeugt, die um den Punkt mit dem höchsten Wert rotieren. Eine Verbesserung kann nur erzielt werden, wenn die Kantenlänge verkürzt wird. Das Verfahren wird abgebrochen, wenn die Eckpunkte hinreichend nah beieinander liegen.

### Gradienten-Strategie

Die Gradientenstrategie - ausgehend von einem Startpunkt im Parameterraum - geht in die Richtung des steilsten Anstiegs. Durch Bildung partieller Ableitungen wird die Richtung des steilsten Anstiegs bestimmt. Die Parameter werden proportional zur Steigung in Richtung des steilsten Anstiegs angepasst. In der Nähe des Optimums ist die Steigung gering, so dass die Anpassung durch kleine Adaptionsschritte erfolgt. In weiterer Entfernung zum Optimum, wenn der Anstieg steiler ist, werden größeren Anpassungsschritte durchgeführt. Die Anwendung der Gradientenstrategie ist nicht auf differenzierbare Funktionen beschränkt, da die Ableitungen über einen Differenzenquotienten approximiert werden können (Schwefel 1995).

### Pattern search-Verfahren

Das originale *pattern search*-Verfahren wurde von Hooke and Jeeves (1961) vorgestellt. Obwohl bereits seit langem bekannt, setzten sich *pattern search*-Verfahren erst nach den Untersuchungen von Torczon (1997) und Lewis et al. (1998), die den Nachweis der Konvergenz der Algorithmen erbrachten, sowie durch steigende Rechenleistung als Optimierungsverfahren in der Praxis durch. Das *pattern search*-Verfahren von Hooke und Jeeves setzt sich aus einer Suche entlang den Koordinatenachsen sowie einer Extrapolation zusammen. Die Schrittweite der Suche ist fest vorgegeben. Suche und Extrapolation werden zyklisch nacheinander durchgeführt. Während des Suchschritts wird eine einfache Gauß-Seidel-Variation durchgeführt, wobei ein Schritt in jede Richtung des Parameterraums gegangen wird.

Der Untersuchungsraum wird ausgehend von einem zufällig gewählten Startpunkt in jede Richtung in einer bestimmten Schrittweite untersucht. Führt eine der Richtungen zur Maximierung der Gütefunktion, wird eine neue Suche gestartet, die an dem neuen Punkt alle möglichen Richtungen untersucht. Führt keine der untersuchten Richtungen zu einer Verbesserung, so wird die Schrittweite halbiert und erneut alle Richtungen untersucht. Eine Verschlechterung bedeutet, dass ein zu großer Schritt erfolgt ist, und die Suche über das gesuchte Maximum hinaus bewegt wurde. Dieser Prozess wird solange wiederholt, bis die Schrittweite ein zuvor festgelegtes Abbruchkriterium unterschreitet.

Auf Basis der *pattern search* von Hooke und Jeeves wurden viele weitere Optimierungsverfahren entwickelt, wie z. B. das *general pattern search* von Torczon (1997), die einen ähnlichen Ansatz verfolgen. Zur Klassifikation dieser Verfahren führen Kolda et al. (2003) den Namen *Generating set search (GSS)* ein, unter dem verschiedene der *pattern search*-Verfahren zusammengefasst sind. Hough et al. (2001) stellen einen Algorithmus zur asynchronen, parallelen *pattern search* (APPS) vor, bei dem alle Suchrichtungen in unabhängigen Prozessen parallel und unabhängig voneinander untersucht werden. Der Algorithmus trifft dabei dynamische Entscheidungen, ohne auf die Ergebnisse aller laufenden Prozesse zu warten. Die Konvergenz des APPS-Algorithmus wird von Kolda and Torczon (2004) nachgewiesen. In der Optimierungssoftware HOPSPACK (Plantenga 2009) ist der APPS-Algorithmus implementiert. Eine detaillierte Beschreibung zu HOPSPACK ist in Kapitel 4.3 zu finden.

### Simulated Annealing

Das Simulated Annealing ist ein stochastisches Optimierungsverfahren (Kirkpatrick et al. 1983; Eglese 1990; van Laarhoven 1992). Das Prinzip des Verfahrens wurde auf Basis physikalischer

Vorgänge der Metallurgie hergeleitet und bezieht sich auf den Abkühlungsvorgang stark erhitzter Festkörper. Der Ansatz wird in der Physik eingesetzt, um Zustände niedriger Energie für komplexe, analytisch nicht lösbare Probleme zu finden.

Die Startwerte beim Simulated Annealing werden zufällig gewählt. Auf Basis von Monte Carlo-Simulationen werden neue Parameterwerte erzeugt. Alte Parameterwerte ( $X_o$ ) werden durch neue Werte ( $X_n$ ) ersetzt, wenn diese besser sind. Sind die neuen Parameterwerte ( $X_n$ ) jedoch schlechter in Bezug auf die Zielfunktion ( $f(X)$ ), so werden die alten Werte mit einer Wahrscheinlichkeit von  $p(T)$  mit

$$p(T) = \exp\left(-\frac{(f(X_o) - f(X_n))}{T}\right) \quad (2.25)$$

ersetzt. Durch einen Faktor, der in der physikalischen Anwendung der Temperatur ( $T$ ) entspricht, wird das Gütekriterium skaliert. Die Temperatur  $T$  wird im Laufe des Optimierungsprozesses reduziert. Dadurch sinkt die Wahrscheinlichkeit, dass schlechtere Lösungen akzeptiert werden.

### Genetische Algorithmen und Evolutionsstrategien

Diese Optimierungsverfahren wurden durch die biologische Evolution inspiriert. Auf Basis der Prinzipien der Evolutionstheorie entwickelten sich dabei zwei ähnliche Optimierungsansätze. Holland stellte 1962 das Prinzip der Genetischen Algorithmen vor, während Rechenberg und Schwefel zur gleichen Zeit die Evolutionsstrategien entwickelten (Schöneburg et al. 1994). Genetische Algorithmen (Schmitt 2001, 2004) und Evolutionsstrategien (Rechenberg 1972; Schöneburg et al. 1994) zählen zu den heuristischen Optimierungsverfahren, die ein Optimum ohne Kenntnisse des Modells bzw. der Parameterinteraktionen finden.

Das Grundprinzip von Genetischen Algorithmen und Evolutionsstrategien ist gleich. Zunächst wird eine Population, die aus zahlreichen Individuen (Parameter-Samples) besteht, zufällig erzeugt. Das Ziel ist, im Verlaufe mehrerer Generationen (Iterationen) die Fitness (das Gütemaß) der Individuen zu verbessern. Ausgehend von der Grundpopulation wird in jeder Generation durch Rekombination und Mutation eine neue Population, die nur die besten Individuen enthält, erzeugt. Durch geringe Veränderungen der einzelnen Individuen und dem Prinzip *Survival of the fittest* bewegen sich die Populationen sukzessiv zum Optimum.

Genetische Algorithmen und Evolutionsstrategien unterscheiden sich dabei hauptsächlich in der Kodierung der Individuen. Während die Individuen bei den Genetischen Algorithmen durch binäre Vektoren kodiert werden, verwenden Evolutionsstrategien Vektoren reeller Zahlen. Genetische Algorithmen konzentrieren sich dabei mehr auf die Kodierung der Informationen während der Evolution. Weitere Unterschiede in den Ansätzen werden u.a. in Schöneburg et al. (1994) vorgestellt.

## 2.4 Komplexität von Ökosystemmodellen

Die Entwicklung von Ökosystemmodellen stellt eine Herausforderung bei der Wahl einer angemessenen Modellstruktur dar, die einerseits komplex genug zur Abbildung der relevanten Prozesse und andererseits einfach genug zur Beantwortung der jeweiligen Fragestellung ist. Der Prozess der Modellentwicklung stellt dabei eine Gratwanderung zwischen der Integration von unnötigen De-

tails und Prozessen und dem Treffen von ungerechtfertigten Vereinfachungen und Annahmen dar (Flynn 2005).

Zur modellgestützten Analyse natürlicher Systeme werden komplexe Modelle entwickelt, in denen zahlreiche Prozesse mit dem Ziel einer möglichst akkuraten Abbildung des betrachteten Systems integriert sind. Die Entwicklung solcher Modelle setzt detailliertes Wissen und Verständnis der betrachteten Prozesse voraus. Ungenaueres Wissen des zu analysierenden Systems erhöht die Unsicherheit bei der Entwicklung komplexer Modelle (Arhonditsis and Brett 2004). Aufgrund der Integration verschiedener Prozesse zeichnen sich komplexe Modelle durch eine hohe Anzahl an Modellparametern aus. Dies erschwert die Kalibrierung solcher Modelle, da oft nicht genügend Daten zur Ableitung der Modellparameter zur Verfügung stehen. Weiterhin neigen Modelle mit einer hohen Parameteranzahl zur Äquifinalität (Perrin et al. 2001), einem Modellverhalten, bei dem verschiedene Parametersätze zu gleichen Modellergebnissen führen (Beven 1993; Beven and Freer 2001). Komplexe Modelle weisen einen erhöhten Rechenaufwand auf, der die Benutzerfreundlichkeit der Modelle verringern kann (Jørgensen 2002). Trotz dieser bekannten Defizite werden komplexe Modelle in der Wissenschaft entwickelt und mit dem Ziel der Erweiterung des Prozessverständnisses des betrachteten Systems eingesetzt. Weiterhin werden diese Modelle zur Aufdeckung von Interaktionen von Systemkomponenten bzw. zum Testen von Hypothesen bezüglich der Analyse des Systemverhaltens angewendet.

Modellentwickler steigern die Komplexität ihrer Modelle durch die Integration weiterer Systemprozesse mit dem Ziel einer Verbesserung der Modellperformanz. Untersuchungen zeigten, dass das Hinzufügen von Prozessen in einem Modell nicht zwangsläufig bzw. teilweise nur zur geringfügigen Verbesserung der Modellperformanz führte (Arhonditsis and Brett 2004; Min et al. 2011). Oft ist es so, dass die erzielte Verbesserung nicht im Verhältnis zur erhöhten Komplexität steht (Paudel and Jawitz 2012). Perrin et al. (2001) zeigten, dass Modelle mit einer hohen Anzahl an Modellparametern gute Ergebnisse bei der Simulation von Daten, die während der Kalibrierung eingesetzt wurden, erzielten. Andererseits demonstrierten Perrin et al. (2001), dass bei der Simulation von unabhängigen Daten während der Validierung einfache Modelle mit wenigen Modellparametern gleichermaßen gute Ergebnisse wie komplexere Modelle erzielten. Ye et al. (1997) und Gan et al. (1997) stellen in ihren Untersuchungen dar, dass komplexe Modelle nicht zwingend bessere Ergebnisse als einfachere Modelle erreichen. Nach Snowling and Kramer (2001) führt die Zunahme von Modellprozessen zu einer Erhöhung der Modellunsicherheit aufgrund der erhöhten Interaktionsmöglichkeiten zwischen Modellzuständen und -parametern. Modelle, die einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Komplexität finden, schneiden bei Modellvergleichen oft am besten ab (Paudel and Jawitz 2012).

Zur Analyse komplexer Systeme werden zunehmend unabhängige Modelle, die jeweils Teilaspekte des Systems abbilden, miteinander zu neuen komplexen Modellsystemen kombiniert (Voinov and Cerco 2010). Diese Zusammenführung von Modellen wird unter dem Begriff *model integration* zusammengefasst (Laniak et al. 2013; Voinov and Shugart 2013; Voinov and Cerco 2010). Ein *integriertes* Modell besteht dabei aus der Kombination von mindestens zwei unabhängigen und eigenständig ausführbaren Modellen. Die Verknüpfung von Modellen führt zu einer gesteigerten Modellkomplexität, die eine Kalibrierung dieser Modellsysteme erschwert (Voinov and Shugart 2013; Voinov and Cerco 2010).

Zur Vereinfachung der Verknüpfung unabhängiger Modelle erfolgte die Entwicklung verschiedener Standards wie *OpenMI* (Open Modeling Interface and Environment) oder *CCA* (Common

Component Architecture). OpenMI (Moore and Tindall 2005; Bulatewicz et al. 2013) beschreibt einen Standard, der zur Verknüpfung hydrologischer Modelle von europäischen Universitäten und privaten Unternehmen entwickelt wurde (Voinov and Cerco 2010). OpenMI definiert eine Schnittstelle, die einen Datenaustausch von zeitabhängigen Modellen während der Laufzeit ermöglicht. Bei der Implementierung des Standards können Modelle parallel ausgeführt werden, wobei ein Datenaustausch zu jedem Zeitschritt möglich ist (Voinov and Cerco 2010). CCA beschreibt eine Architektur zur Kombination verschiedener Komponenten im Bereich des Hochleistungsrechnens (Armstrong et al. 1999; Lefantzi et al. 2003). Das Ziel von CCA ist die Definition einer minimalen Schnittstelle, die verschiedene Komponenten bzw. Modelle implementieren müssen, um miteinander zu einer ausführbaren Anwendung verknüpft werden zu können. Das Ziel dieses Standards ist die Förderung von Interoperabilitäten von verschiedenen, unabhängigen Software-Komponenten. Parallel zur Entwicklung komplexer Modelle hat sich eine Gegenbewegung etabliert, die die Entwicklung 'einfacher' Modelle (*parsimonious models*) propagiert (Burnham and Anderson 2002). Ein Modell sollte dabei so einfach wie möglich sein (Chwif et al. 2000), wobei nur die Prozesse abgebildet werden, die zur Beantwortung der betrachteten Fragestellung relevant sind. Einfache Modelle sind aufgrund der geringeren Anzahl an Prozessen und Modellparameter einfacher zu verstehen und einzusetzen (Chwif et al. 2000). Aufgrund der vereinfachten Abbildung des zu betrachtenden Systems lassen sich einfache Modelle leichter validieren bzw. Änderungen leichter realisieren (Chwif et al. 2000). Einfache Modelle finden ihre Anwendung in der Lösung von Management-Aufgaben, bei denen oft durch die Analyse verschiedener Szenarien mit Hilfe eines Modells die beste Lösung identifiziert werden soll.

#### 2.4.1 Modellkomplexität - Definition und Quantifizierung

Im Bereich der Ökosystemmodellierung werden verschiedene Ansätze zur Definition der Modellkomplexität diskutiert, da keine allgemeingültige Definition des Begriffs existiert. Die vorgestellten Komplexitätsdefinitionen variieren in Abhängigkeit des jeweiligen Kontextes voneinander (Edmonds 2000).

Eine erste Definition des Begriffs der Modellkomplexität wurde von Simon (1962) vorgestellt, der die Komplexität eines Systems mit der Anzahl der enthaltenen Teile und Elemente assoziiert. Nach Costanza and Sklar (1985) wird die Komplexität eines Modells durch die Modellgröße – quantifiziert durch die Anzahl der Modellparameter – sowie durch die zeitliche und räumliche Auflösung bestimmt. Sie stellen in ihrer Arbeit ein Maß zur Quantifizierung der Effektivität von Modellen vor, das die Komplexität und die Modellgenauigkeit ins Verhältnis setzt. Myung et al. (2009) fügen dieser Definition Attribute wie Robustheit, Interpretierbarkeit und Übertragbarkeit eines Modells hinzu. Dabei verstanden sie unter dem Begriff der Robustheit die Fähigkeit des Modells, bekannte Observationen wiederzugeben. Golay et al. (1989) setzen den Begriff der Modellkomplexität mit der Schwierigkeit, das untersuchte System zu verstehen, gleich. Snowling and Kramer (2001) beziehen den Begriff der Modellkomplexität auf die Modellstruktur und dem Detaillierungsgrad der Prozesse, der sich aus der Anzahl der Modellparameter, -zuständen und der algorithmischen Umsetzung der Prozesse zusammensetzt.

Nach Paudel and Jawitz (2012) wird die Bestimmung der Komplexität eines Modells durch die vielfältige Natur der durch das Modell adressierten Probleme, dem Modellierungszweck, den getroffenen Annahmen und den resultierenden Vereinfachungen erschwert. In ihrer Definition der

Modellkomplexität führen sie Attribute wie Modellierungsaufwand und -kosten sowie Unsicherheit in den Modellparametern auf. Die Komplexität eines Modells wird in ihrem Ansatz durch die

- Anzahl der Modellkomponenten und -zustände,
- Anzahl der Prozesse,
- Anzahl der prozess-spezifischen Modellparameter,
- Qualität und Verfügbarkeit der notwendigen Daten,
- Unsicherheiten in den Modellparametern,
- Modellierungsaufwand und -kosten,
- Verständlichkeit des Modells und
- Zielstellung des Modells

bestimmt.

Für den Vergleich unterschiedlicher Modelle unter Berücksichtigung der Modellkomplexität wurden verschiedene Kriterien entwickelt. Chwif et al. (2000) betonen dabei, dass es kein allgemeingültiges Maß zur Quantifizierung der Modellkomplexität gibt, da keines der existierenden Maße in der Lage ist, alle Aspekte der Komplexität eines Modells zu berücksichtigen.

#### Akaike's Informationskriterium (AIC)

Das AIC (Akaike 1973, 1998) ist ein auf der Informationstheorie basierendes, statistisches, wahrscheinlichkeitstheoretisches Kriterium. Es wurde entwickelt, um aus einer Vielzahl an möglichen Modellen dasjenige auszuwählen, das eine gute Vorhersagefähigkeit mit möglichst wenigen Modellparametern besitzt (Myung et al. 2009).

In die Berechnung des AIC fließt die Diskrepanz der durch das mathematische Modell errechneten und der gemessenen Werte ein. Weiterhin wird die Anzahl der Modellparameter berücksichtigt, wobei eine höhere Anzahl und damit auch eine gesteigerte Komplexität als negativ gewertet wird. Das AIC berechnet sich aus

$$AIC = -2 \ln f(q|x^*) + 2n \quad (2.26)$$

mit  $q = [q_1, \dots, q_k]$  als Vektor der Messdaten,  $\ln f(q|x^*)$  als natürlicher Logarithmus des maximalen Wertes der Likelihood-Funktion des Modells für den Parametervektor  $x^*$  und  $n$  der Modellparameteranzahl. Der erste Term ist ein Maß der Modellperformanz (*Goodness of fit*), während der zweite Term die Modellkomplexität beschreibt. Je kleiner der Wert des AIC, desto besser das betrachtete Modell.

Stehen nur wenige Datensätze für die Berechnung zur Verfügung, wird eine Bias-Korrektur des AICs vorgenommen. Hurvich and Tsai (1989) und Burnham and Anderson (2002) schlagen eine Korrektur vor, wenn das Verhältnis der Anzahl der Datenpunkte und der Anzahl der Modellparameter ( $k/n$ ) klein ist (ca.  $< 40$ ). Das korrigierte  $AIC_c$  berechnet sich aus

$$AIC_c = -2 \ln f(q|x^*) + 2n + \frac{2n \cdot (n+1)}{k - n - 1} \quad (2.27)$$

mit  $k$  als Anzahl der zur Verfügung stehenden Messdatensätze.

### Bayes Informationskriterium (BIC)

Das BIC oder auch Schwarz Kriterium (SIC) ist ähnlich wie das AIC ein Informationskriterium, das neben der Modellperformanz auch die Modellkomplexität berücksichtigt (Schwarz 1978). Es berechnet sich aus

$$BIC = -2 \ln f(q|x^*) + n \ln(k) \quad (2.28)$$

mit  $q = [q_1, \dots, q_k]$  als Vektor der Messdaten,  $\ln f(q|x^*)$  als natürlicher Logarithmus des maximalen Wertes der Likelihood-Funktion des Modells für den Parametervektor  $x^*$ ,  $n$  der Modellparameteranzahl und  $k$  der Anzahl der Messdatensätze. Im Unterschied zum AIC berücksichtigt der 2. Term des BIC, der die Modellkomplexität quantifiziert, zusätzlich die Anzahl der zur Verfügung stehenden Messdaten. Modelle mit einer großen Parameteranzahl werden dadurch schlechter bewertet als beim AIC. Je kleiner der Wert des BIC, desto besser ist das Modell.

### Henriksen's algebraischer Ausdruck zur Quantifizierung der Modelleffizienz

Henriksen (2008) stellt in seinen Betrachtungen zur Reduktion der Modellkomplexität einen Ausdruck vor, der die Effizienz und Nützlichkeit von Simulationsmodellen misst. Das von ihm vorgeschlagene Gütemaß stellt eine Gütefunktion dar, die vom Modellierer zu maximieren ist. Die Zielfunktion *ME* ist wie folgt definiert:

$$ME = \frac{\text{Anwendbarkeit} \times \text{Korrektheit} \times \text{Folgsamkeit} \times \text{Benutzerfreundlichkeit} \times \text{Performanz}}{\text{Aufwand} \times \text{Komplexität}} \quad (2.29)$$

wobei die *Anwendbarkeit* ein Maß für die Eignung des Simulationsmodells zur Lösung des Problems und *Korrektheit* die Wahrscheinlichkeit über die Richtigkeit des vom Modell erzeugten Ergebnisses darstellt. Unter *Folgsamkeit* versteht Henriksen (2008) die Eigenschaft des Modells das zu tun, wofür es programmiert worden ist. Mit dem Maß der *Benutzerfreundlichkeit* erkennt Henriksen (2008) an, dass die Effizienz von der Benutzerfreundlichkeit des eingesetzten Modells beeinflusst wird. *Performanz* beschreibt die Ausführungszeit des Modells. *Aufwand* und *Komplexität* limitieren die Modelleffizienz, wobei die zwei Größen direkt proportional zueinander sind. Bei steigender Komplexität erhöht sich auch gleichzeitig der Aufwand, was zu einer sinkenden Modelleffizienz führt, wenn die Erhöhung der Komplexität zu keiner Erhöhung der Faktoren im Zähler des Ausdrucks führt (Barlow 2009).

#### 2.4.2 Vereinfachung von Modellen

Bereits in den 80er Jahren wurden Untersuchungen zur Vereinfachung von Modellen durchgeführt. Es wurde die Notwendigkeit zur Reduktion unnötiger Modellkomplexität erkannt. Als erstes wurde das Problem von Zeigler (1979) adressiert, der die Vereinfachung von Modellen als eine Möglichkeit zur Verbesserung dieser aufführte.

Nach Barlow (2009) dient die Modellvereinfachung der Reduktion der Modellkomplexität, die eine Verbesserung des Modells ohne Verlust der Validität der Simulationsergebnisse zur Folge hat. Die Vereinfachung von Modellen führt zu einer Veränderung des Modellverhaltens. Mit zunehmender Vereinfachung erhöht sich die Abweichung des Modellverhaltens zwischen dem vereinfachten und originalen Modell (Huber and Dangelmaier 2009).

Nach Innis and Rexstad (1983) haben vereinfachte Modelle folgende Vorteile:



- **Billiger**

Die Ergebnisse vereinfachter Modelle sind leichter zu verarbeiten, so dass eine eingehende Analyse des Modells ermöglicht wird.

- **Reduzierte Input-Anforderung**

Einfache Modelle benötigen eine geringere Anzahl an Eingangsdaten bzw. Daten in einer größeren Auflösung.

- **Vereinfachte Übertragung bzw. Kombination mit anderen Modellen**

Durch eine Modellvereinfachung wird die Integration eines Modells in ein größeres System erleichtert. Weiterhin ist ein einfaches Modell leichter zu dokumentieren und ermöglicht somit eine einfachere Übertragung und Anwendung des Modells in einer anderen Situation.

- **Bessere Interpretation**

Durch eine reduzierte Anzahl von Modellzuständen bzw. -parametern wird das Verständnis des Modells und dessen Eigenschaften erhöht.

Weitere positive Aspekte vereinfachter Modelle sind schnellere Ausführungszeiten, erhöhte Flexibilität, vereinfachte Interpretierbarkeit der Ergebnisse und besseres Verständnis der Modellstruktur (Innis and Rexstad 1983; Frantz 1995; Chwif et al. 2000; Henriksen 2008; Barlow 2009).

In verschiedenen Studien wurden Vorgehensweisen zur Reduktion der Modellkomplexität bzw. Abstraktion von Modellen als Möglichkeit zur Modellvereinfachung untersucht. In Zeigler (1979) werden vier Möglichkeiten zur Vereinfachung beschrieben: (1) das Weglassen von unwichtigen Teilen des Modells, (2) die Ersetzung von Teilmodellen durch Zufallsvariablen, (3) die Vergrößerung des Wertebereichs von Modellparametern sowie (4) die Zusammenfassung und Abstraktion von verschiedenen Teilmodellen.

Innis and Rexstad (1983) beschreiben 17 Vereinfachungstechniken sowie Vorgehensweisen zur Identifikation von Teilen eines Modells, die für eine Vereinfachung in Frage kommen. Sie zählen die Verbesserung der Lesbarkeit des Modellquellcodes zu einer wesentlichen Vereinfachung. In ihren Untersuchungen betonen sie, dass es keine allgemeingültige Methode zur Modellvereinfachung gibt. Die Art der möglichen Vereinfachung hängt von der Zielstellung des Modells sowie von der Zielstellung der Modellvereinfachung ab. In Rexstad and Innis (1985) stellen sie die Anwendung verschiedener Vereinfachungstechniken am Beispiel von drei Modellen vor.

Weitere Ansätze zur Modellvereinfachung sind:

- **Eliminierung unwichtiger Modellkomponenten**

Bei dieser Vereinfachungsform werden Modellkomponenten, Modellzustände, Teilprozesse bzw. Modellparameter mit untergeordneter Bedeutung ersatzlos entfernt. Die Identifikation der Komponenten eines Modells, die entfernt werden können, stellt eine große Herausforderung dar (Barlow 2009). Innis and Rexstad (1983) sowie Frantz (1995) führen die Sensitivitätsanalyse als Hilfsmittel zur Identifikation unwichtiger Parameter bzw. Teilsysteme mit geringem Einfluss auf die Systemdynamik auf.

- **Ersetzung von Modellparametern und -variablen**

Durch die Ersetzung von Modellparametern und -variablen durch Konstanten kann eine Vereinfachung des Modells erzielt werden (Crout et al. 2009). Lawrie and Hearne (2007) stellen

zwei Ansätze zur Reduktion der Modellkomplexität vor, in denen unwichtige Modellzustände und -variablen automatisch erkannt werden und entweder eliminiert oder konstant gesetzt werden.

- **Integration von Teilmodellalternativen**

Die Ersetzung eines Teilmodells durch alternative, vereinfachte Modelle ist eine zentrale Vereinfachungsform, die mehrfach diskutiert bzw. angewendet worden ist (Zeigler 1979; Rexstad and Innis 1985; Thomas et al. 2008; Huber and Dangelmaier 2009). Zu den vereinfachten Ansätzen zählen beispielsweise Regressionsmodelle, Neuronale Netze oder Fuzzy-Modelle.

- **Reduktion der zeitlichen und örtlichen Auflösung**

Durch Veränderung des Zeitschritts eines Modells bzw. der räumlichen Auflösung kann die Rechenkomplexität eines Modells reduziert werden.

- **Verbesserung des Modell-Quellcodes**

Nach Innis and Rexstad (1983) führt die Verbesserung der Lesbarkeit des Modell Quellcodes zur Vereinfachung beim Debuggen bzw. zur Erhöhung der Ausführungsgeschwindigkeit. Dabei kann eine Verbesserung des Quellcodes durch die Entfernung von Modellartefakten, die beispielsweise durch die Übertragung eines Modells in eine andere Programmiersprache entstehen können, erzielt werden.

Verschiedene Techniken des *Refactorings* – einem Ansatz aus dem Bereich der Software-Entwicklung zur Strukturverbesserung des Quellcodes – können zur Modellvereinfachung angewendet werden. Durch das Refactoring erfolgt eine Verbesserung der Lesbarkeit und Verständlichkeit des Quellcodes, wobei das Software-Verhalten nicht verändert wird. In Fowler and Beck (1999) sind verschiedene Refactoring-Techniken erläutert, die zur Verbesserung des Quellcodes im Sinne der Modellvereinfachung anwendbar sind.

- **Veränderung der Software-technischen Umsetzung**

Innis and Rexstad (1983) stellen die Umsetzung des Modells in eine andere Computersprache zur Vereinfachung des Modell-Quellcodes als mögliche Modellvereinfachungsform vor.

### 3 MONICA - Modell für Kohlenstoff und Stickstoff in Agrarökosystemen

MONICA (Nendel et al. 2011a) ist ein dynamisches, prozessbasiertes Agrarökosystemmodell zur Untersuchung der Auswirkungen von veränderten Anbausystemen und Klimawandel auf Pflanzenentwicklung und Bodensysteme. Aktuell ist das Modell für Anwendungen in Zentraleuropa ausgelegt, eine Erweiterung der Anwendungsregion auf Südamerika wird im Rahmen des CarBioCial-Projektes (Kohlenstoff-Sequestrierung, Biodiversität und soziale Strukturen in Süd-Amazonien: Modelle und die Implementierung Kohlenstoff-optimierter Landmanagementstrategien) durchgeführt.

In MONICA sind verschiedene Ansätze etablierter Modelle integriert. Der Modell-Kern beschreibt das Pflanzenwachstum basierend auf Algorithmen aus HERMES (Kersebaum and Richter 1991), einem Simulationsmodell für die Stickstoff-Dynamik in landwirtschaftlichen Systemen. Zur Erweiterung von MONICA um die Prozesse des Kohlenstoff-Kreislaufs wurden Konzept und Ansätze des DAISY-Modells (Abrahamsen and Hansen 2000) integriert. Des weiteren wurde das Pflanzenwachstumsmodell von MONICA um Prozesse zur Beschreibung des Einflusses von atmosphärischem CO<sub>2</sub> auf die Photosynthese und Transpiration erweitert (Nendel et al. 2009). Der Bodenwasserhaushalt wird nach dem Kapazitätsansatz modelliert (Wegehenkel 2000), in dem Wassermengen einer Bodenschicht oberhalb der Feldkapazität an die jeweils untere Bodenschicht weitergegeben werden. Die Evapotranspiration wird nach dem Ansatz von Penman-Monteith (Allen et al. 1998) bestimmt, der die Berechnung der Verdunstung an der oberen Profilgrenze (Evaporation) bzw. der Pflanze (Transpiration) integriert. Für grundwassernahe Standorte wird die Dynamik des Grundwasserflurabstandes mit einbezogen. Basierend auf Algorithmen des EU-RotateN-Modell (Rahn et al. 2010) können für die langfristige Simulation von Klimaszenarien N-Düngung und Bewässerung automatisch gesteuert werden.

Durch die Spezifikation von Pflanzenparametern zur Beschreibung der Pflanzenphysiologie und -ontogenese kann MONICA für die Analyse einzelner Fruchtarten als auch gesamter Fruchtfolgen eingesetzt werden. In längerfristigen Simulationen können so Auswirkungen beim Anbau ganzer Fruchtfolgen untersucht werden.

#### 3.1 Beschreibung der Boden- und Pflanzenprozesse

MONICA berechnet im Tagesschrittintervall Prozesse, die Einfluss auf den biochemischen Umsatz von Kohlenstoff (C) und Stickstoff (N) in der Pflanze und im Boden sowie auf deren Transport im Boden und in der Luft haben. Durch Integration verschiedener Boden- und Pflanzenprozesse werden Ausgangsgrößen wie Ertrag, Bodenfeuchte, Bodentemperatur, N- und C-Gehalt im Boden, NH<sub>3</sub>-, N<sub>2</sub>O- und CO<sub>2</sub>-Emissionen, N-Mineralisation aus Ernterückständen oder Wirtschaftsdüngern, Denitrifikation, Grundwasserneubildungsrate, N-Auswaschung oder Bestandesverdunstung berechnet.

Abbildung 3.1 enthält eine schematische Darstellung, in der die verschiedenen Prozesse und Stoff-

flüsse des MONICA-Modells dargestellt sind. Die Abbildung spiegelt den modularen Aufbau von MONICA wider, welches in Module zur Berechnung des Bodenwasserhaushalts, der Bodentemperatur, Stofftransport und Umsatz organischer Substanz im Boden sowie in ein Pflanzenwachstumsmodul unterteilt ist.

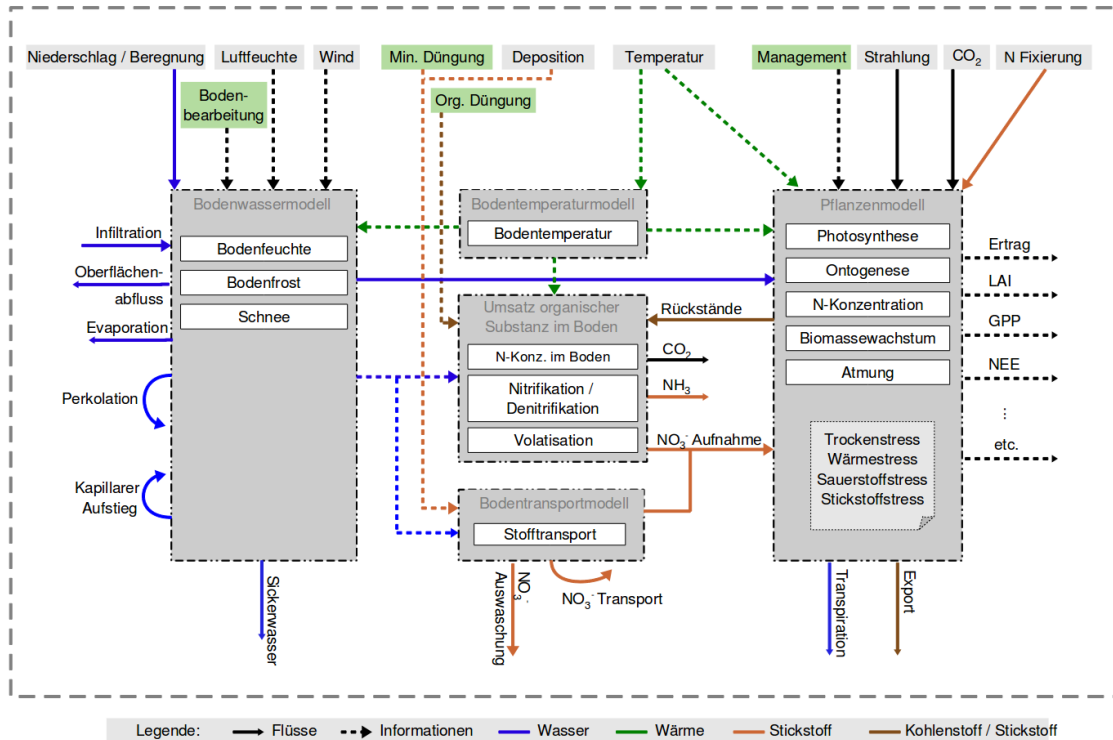


Abbildung 3.1: Darstellung der Boden- und Pflanzenprozesse von MONICA.

Der Boden in MONICA wird in 10 cm große, diskrete Schichten unterteilt. Basierend auf diesem Schichtenmodell werden bestimmte Bodenparameter wie Bodenfeuchte oder -temperatur für jede Schicht individuell berechnet. Die Berechnung des Wassergehalts folgt einem Kapazitätsansatz, wobei eine Bodenschicht bis zur Feldkapazitätsgrenze aufgefüllt wird. Überschüssiges Wasser wird an die darunter liegenden Schichten abgegeben. Der Wassergehalt des Bodens wird durch den infiltrierenden Niederschlag, die Evaporation und die Aufnahme des Wassers durch die Pflanzenwurzel beeinflusst. Der Einfluss des Grundwassers wird durch Berechnung des kapillaren Aufstiegs berücksichtigt.

Durch den Wassertransport im Boden wird ebenfalls auch Nitrat verlagert. Nitrat entsteht durch Ammonifikation, dem Umsatz organischer Substanz zu Ammonium, und durch anschließende Nitrifikation, dem Umsatz von Ammonium zu Nitrat. Unter anaeroben Bedingungen kann durch den Prozess der Denitrifikation Nitrat zu gasförmigen, molekularen Stickstoff ( $N_2$ ) reduziert werden, wobei das Treibhausgas  $N_2O$  freigesetzt wird (Scheffer and Schachtschabel 1998). MONICA simuliert den Stoffwechsel der Mikroorganismen, bei dem  $CO_2$  entweicht. Bei der Ausbringung von Wirtschaftsdüngern bzw. bei der Hydrolyse von Harnstoff wird  $NH_3$  freigesetzt.

Auf Basis der Berechnung des optimalen N-Gehalts in der Pflanze wird die N-Aufnahme der Pflanze aus dem Boden berechnet. Ein spezieller Modellparameter spezifiziert den kritischen N-Gehalt einer Pflanze. Ist diese Schwelle erreicht, steht der Pflanze zu wenig N zum Wachsen zur Verfügung. In einer solchen Stresssituation wie auch bei Wassermangel wird das Pflanzenwachstum

reduziert.

In MONICA wird ebenfalls das Wurzelwachstum berechnet. Wichtige Parameter sind dabei die pflanzenspezifische, maximale Durchwurzelungstiefe, die Wurzelwachstumsgeschwindigkeit sowie die Dichte der Wurzelmasse. Die berechnete Wurzelmasse und die resultierende Wurzeltiefe und -dichte beeinflusst die Wasser- und N-Aufnahmefähigkeit der Pflanze. Aufgrund dieser Abhängigkeit werden Rückkopplungseffekte zwischen dem Biomassewachstums und der Nährstoffaufnahme simuliert.

Das Biomassewachstum erfolgt nach dem SUCROS-Ansatz (Van Keulen et al. 1982), bei dem die Höhe der Assimilat-Bildung in Abhängigkeit von der Globalstrahlung berechnet wird. Die Globalstrahlung wird photosynthetisch umgesetzt und die entstehenden Assimilate (Kohlenhydrate) in Abhängigkeit von der Pflanzenentwicklung auf die jeweiligen Pflanzenorgane verteilt. Pflanzenspezifische Parameter geben für jedes Entwicklungsstadium eine individuelle Verteilung der gebildeten Kohlenhydrate vor. In frühen Entwicklungsstadien wird zunächst das Wachstum der Wurzeln und Blätter, in den späteren Stadien das der Sprossachse und Frucht gefördert. Für die Blätter wird zusätzlich der Blattflächenindex (LAI) berechnet, der wiederum als primärer Faktor in die Photosynthese eingeht. Auf Basis des LAIs wird der Bodenbedeckungsgrad berechnet, der Einfluss auf die Höhe der Evapotranspiration – der Verdunstung von Pflanze und Boden – hat. Die aktuelle Evapotranspiration wird mit Hilfe von entwicklungsstadien-abhängigen  $K_c$ -Faktoren berechnet. Ausgehend von der potentiellen Evapotranspiration ( $ET_0$ ) einer kurzgeschnittenen Grasfläche wird die aktuelle Evapotranspiration ( $ET_{akt}$ ) einer Pflanze durch Multiplikation der  $K_c$ -Faktoren mit der potentiellen Evapotranspiration berechnet.

Die Pflanzenentwicklung wird in unterschiedliche Entwicklungsstadien unterteilt. Über einen Temperatursummenansatz wird das jeweilig aktuelle Entwicklungsstadium berechnet. Erst beim Erreichen einer stadienspezifischen Temperatursumme wird ein Wechsel in das nächste Stadium vollzogen. Die Pflanzenentwicklung kann durch Mangel an Wasser oder N im Boden, aber auch durch starke Hitze negativ beeinflusst werden. Im Falle einer solchen Stresssituation wird die Photosynthese reduziert. In Abhängigkeit von der Pflanzenart kann es zur beschleunigten Entwicklung (Notreife) kommen.

Bei Ernte der Pflanze verbleiben Ernterückstände im und auf dem Boden. Diese werden abgebaut und tragen zum Humuserhalt und N-Mineralisation im Boden bei. Die unterschiedlichen Abbaueigenschaften von organischem Material werden in MONICA durch verschiedene Parameter beschrieben. So kann das Abbauverhalten von unterschiedlichen Pflanzen realistisch simuliert werden.

## 3.2 Strukturelle und technische Details

MONICA ist modular aufgebaut (Abbildung 3.2) und setzt sich stark verallgemeinert aus einer Konfigurationskomponente zur Verwaltung der Simulationsdaten, dem eigentlichen Prozesskern zur Berechnung der Boden- und Pflanzenprozesse sowie aus Datenstrukturen zur Speicherung und Weiterverarbeitung von Modellergebnissen zusammen.

Für die Durchführung von Simulationen sind zwei Schnittstellen zur Bereitstellung von Simulationsdaten im Modell realisiert:

1. Einlesen von Simulationstextdateien

## 2. Anbindung an die EVA-Projektdatenbank.

Bei Verwendung der dateibasierten Schnittstelle werden die notwendigen Eingangsdaten der Simulationen aus separaten Text-Dateien eingelesen. Eine ausführliche Beschreibung der notwendigen Dateien sowie des erforderlichen Dateiformats befindet sich im Benutzerhandbuch von MONICA (Nendel 2013).

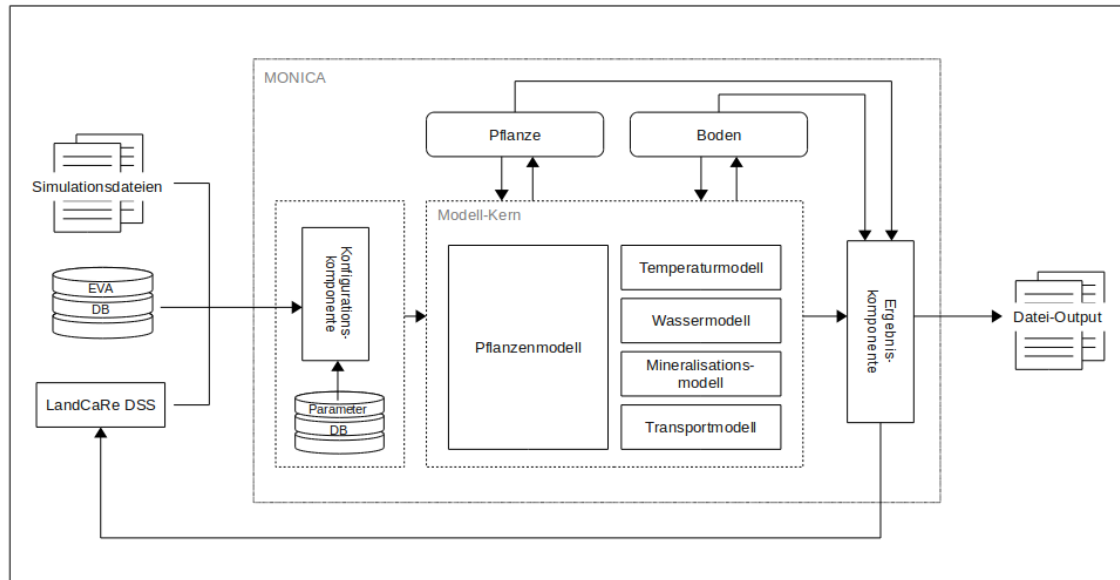


Abbildung 3.2: Aufbau des MONICA-Modells.

Die zweite Schnittstelle wurde speziell für den Einsatz des Modells im EVA 2-Projekt entwickelt. Die erforderlichen Simulationsdaten werden direkt durch das Ausführen verschiedener MySQL-Anfragen aus der projekteigenen MySQL-Datenbank ausgelesen. Abbildung 3.3 enthält einen Auszug aus der EVA-Projektdatenbank mit einer Beschreibung der Tabellen, in denen für Modellsimulationen relevante Informationen gespeichert sind. Diese direkte Anbindung an die EVA-Datenbank stellt sicher, dass für die Modellsimulationen immer die aktuellsten Informationen der Projektdatenbank verwendet werden.

In der Konfigurationskomponente wird durch das Einlesen der Simulationsdaten aus einer der drei Schnittstellen ein zentrales Konfigurationsobjekt erzeugt. Pflanzenspezifische Parameter des Modells werden dem Modell aus einer internen relationalen Datenbank (DB) zugeführt. Zur Ausführung einer Modellsimulation wird das Konfigurationsobjekt an den Modellkern weitergegeben. Im Modellkern werden auf Basis der Informationen des Konfigurationsobjekts verschiedene Modellkomponenten initialisiert. Für jede Simulation wird ein Startdatum konfiguriert. Ausgehend vom Startdatum werden in einer Schleife in Tagesschrittweite Boden- und Pflanzenprozesse berechnet. Ergebnisse der Berechnungen werden in separaten Objekten für Boden und Pflanze zwischengespeichert, so dass diese für Berechnungen des folgenden Tagesschritts zur Verfügung stehen.

Die Ergebniskomponente verwaltet verschiedene Ergebnisse der Berechnungen, so dass diese nach Simulationsende analysiert und weiterverarbeitet werden können. In verschiedenen Datenstrukturen werden sowohl tägliche Ergebnisse der Modellsimulationen (z.B. Bodenfeuchte,  $N_{\min}$ ) als auch bereits aggregierte Werte (Ertrag, akkumuliertes Sickerwasser) verwaltet. Eine Auswahl ver-

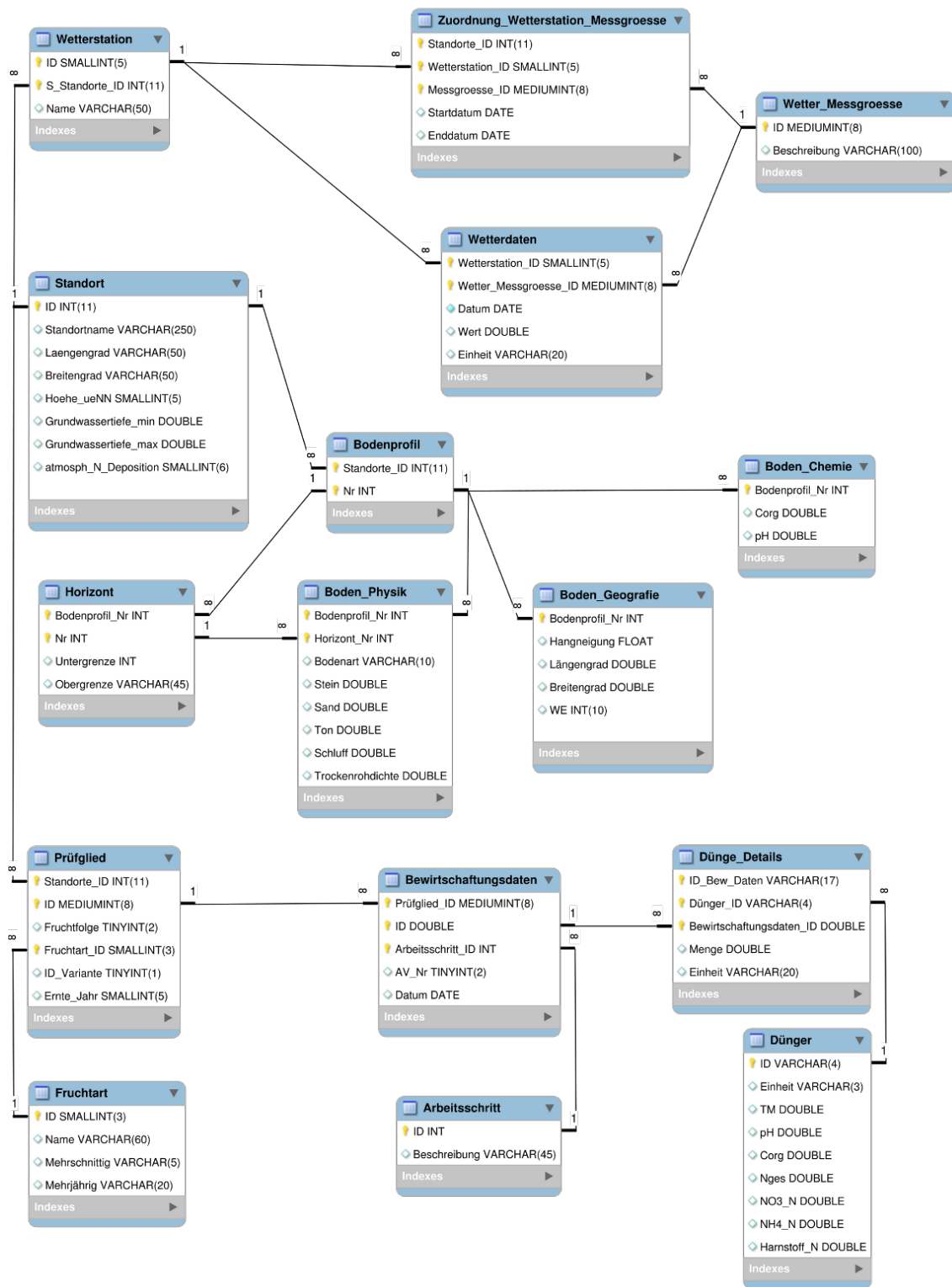


Abbildung 3.3: Auszug aus der EVA-Projektdatenbank.

schiedener, täglicher Simulationsergebnisse wird in CSV-basierten Textdateien abgelegt.

Darüber hinaus ist MONICA in der interaktiven Wissensplattform LandCaRe-DSS integriert (Wenkel et al. 2013; Nendel et al. 2011b; Wenkel et al. 2010a). MONICA-Simulationen werden direkt über das Nutzerinterface des DSS initiiert und ausgewertet. Die Eingangsdaten der Simulationen werden aus der internen Datenbank des DSS bereitgestellt. Die Kopplung zwischen dem DSS und MONICA ist auf der Quellcode-Ebene realisiert. Die Verwendung des LandCaRe-DSS ermöglicht durch die grafische Aufbereitung der Modellergebnisse bereits eine direkte Auswertung der Simulationsergebnisse im Anschluss an die Simulation.

### 3.3 Eingangsdaten des Modells

MONICA benötigt für die Simulation Angaben zum Anbausystem, Standort, Bodenprofil und Wetterdaten, letztere in täglicher Auflösung. Tabelle 3.1 listet die Variablen zur Beschreibung der Bewirtschaftungsdaten einer Fruchtart auf. Die Berechnung einer gesamten Fruchtfolge erfordert die Spezifikation des Anbaus mehrerer Fruchtarten. In Tabelle 3.2 sind die möglichen Eingangsvariablen zur Beschreibung des Standorts und des Bodenprofils angegeben. Tabelle 3.3 enthält die erforderlichen Klimavariablen einer MONICA-Simulation.

Tabelle 3.1: Eingangsvariablen zur Beschreibung eines Anbausystems in MONICA.

Variable	Einheit
Fruchtart	
Aussaatdatum	[dd-mm-yyyy]
Erntedatum	[dd-mm-yyyy]
Datum der Bodenbearbeitung	[dd-mm-yyyy]
Tiefe der Bodenbearbeitung	[m]
Datum der Stickstoffdüngung	[dd-mm-yyyy]
Art des Stickstoffdüngers	
Stickstoffdüngermenge	[kg N]
Bewässerungsdatum*	[dd-mm-yyyy]
Bewässerungsmenge*	[mm d <sup>-1</sup> ]
Anteil der Ernterückstände	[%]

\* Optional



Tabelle 3.2: Angaben zu Standort- und Bodeninformationen in MONICA.

Variable	Einheit
Horizontgrenzen	[m]
Breitengrad	[°]
Sandgehalt	[%]
Tongehalt	[%]
Bodenart <sup>+</sup>	
Lagerungsdichte	[kg m <sup>-3</sup> ]
Organische Bodensubstanz	[%]
pH <sup>*</sup>	
Steingehalt <sup>*</sup>	[%]

<sup>+</sup> Anstelle der Angaben zum Sand- und Tongehalt kann die Angabe der Bodenart nach der Klassifizierung der Bodenkundlichen Kartieranleitung (Ad-Hoc-Arbeitsgruppe Boden 2005) erfolgen

<sup>\*</sup> Optional

Tabelle 3.3: Beschreibung der Klimaeingangsdaten für die Simulation mit MONICA.

Variable	Einheit
Min. Lufttemperatur (2m)	[°C]
Mittlere Lufttemperatur (2m)	[°C]
Max. Lufttemperatur (2m)	[°C]
Windgeschwindigkeit	[m s <sup>-1</sup> ]
Niederschlag	[mm]
Globalstrahlung <sup>§</sup>	[MJ m <sup>-2</sup> ]
Sonnenscheindauer <sup>§</sup>	[h]
Relative Luftfeuchte	[%]
CO <sub>2</sub> -Konzentration <sup>*</sup>	[ppm]

<sup>§</sup> Entweder Globalstrahlung oder Sonnenscheindauer

<sup>\*</sup> Optional

### 3.4 Softwaretechnische Realisierung

MONICA ist in C++ implementiert, um eine hohe Verarbeitungsgeschwindigkeit zu realisieren. Das Modell ist so in der Lage, auch lange Simulationszeiträume von mehreren Jahren in wenigen Sekunden zu berechnen. Das Modell ist *Open Source* und läuft auf Linux<sup>®</sup>- und Windows<sup>®</sup>-Systemen.

Die Implementierung spiegelt den konzeptionell modularen Aufbau von MONICA wieder (Kapitel 3.2). In Abbildung 3.4 ist ein vereinfachtes Klassendiagramm der softwaretechnischen Realisierung von MONICA, abgeleitet aus der aktuellen Implementierung, dargestellt. Aus Gründen der Übersicht wurde auf die Abbildung von Methoden und Attributen der Klassen verzichtet.

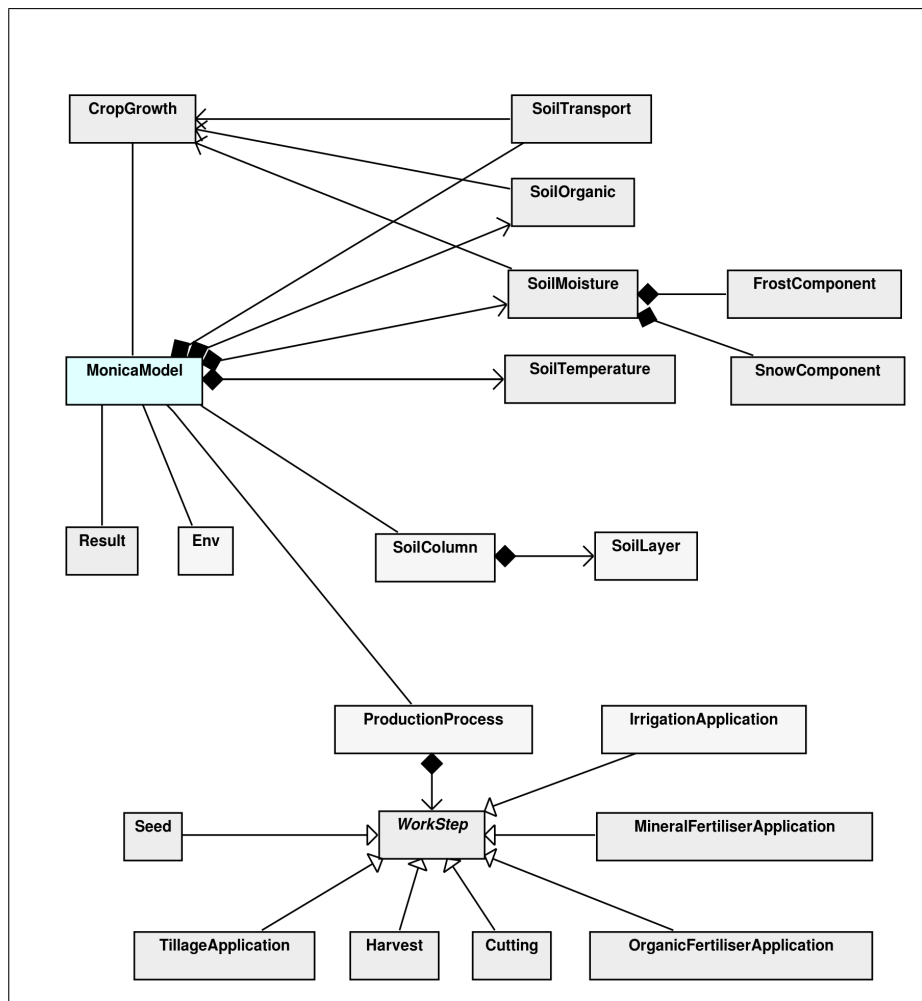


Abbildung 3.4: Vereinfachtes Klassendiagramm der aktuellen Implementierung von MONICA.

*MonicaModel* stellt die zentrale Klasse der Implementierung dar. Diese Klasse enthält Referenzen auf alle Teilmodelle (*CropGrowth*, *SoilTransport*, *SoilOrganic*, *SoilMoisture*, *SoilTemperature*) sowie Datenstrukturen (*SoilColumn*) zur Speicherung der Modellzustände. Die in Abbildung 3.1 spezifizierten Teilmodelle von MONICA sind als individuelle C++-Klassen formuliert. In der *Env*-Klasse erfolgt die Speicherung aller, zur Simulation notwendigen Eingangsdaten wie Boden- oder Klimainformationen. Der Produktionsprozess (*ProductionProcess*) speichert alle Arbeitsschritte beim Anbau einer Fruchtart. Aktuell sind die Arbeitsschritte Bodenbearbeitung, Aussaat, minera-

liche und organische Düngung, Beregnung, Schnitt sowie Ernte implementiert. Die Ergebnisse der Modellsimulation werden in einem Objekt der *Result*-Klasse abgelegt, welches am Ende der Modellsimulation zur weiteren Verarbeitung ausgewertet werden kann.

Bei der Implementierung von MONICA (Wenkel et al. 2010b) werden bestehende Datenstrukturen und Methoden von öffentlichen Bibliotheken des LandCaRe-DSS genutzt (Wenkel et al. 2013). Beispielsweise erfolgt eine Verwendung verschiedener Datenbank-Abstraktionsklassen der *db*-Bibliothek für den Zugriff auf die MySQL-Datenbank der EVA-Projekte (Wenkel et al. 2010a). Zur Abstraktion der Klimadaten werden Datenstrukturen der *climate*-Bibliothek eingesetzt. Die Implementierung der Datum-Klasse aus der *tools*-Bibliothek, die verschiedene Methoden zur Verwaltung und Manipulation von Zeitangaben beinhaltet, wird ebenfalls in MONICA verwendet (Wenkel et al. 2010a). Zusätzlich zu diesen Bibliotheken werden Smartpointer und Funktionszeiger der Boost-Bibliothek (Nakariakov 2013; Boost 2013) in MONICA eingesetzt. Zur Gewährleistung der Thread-Sicherheit der MONICA-Implementierung werden Datenstrukturen der Loki-Bibliothek (Alexandrescu 2013) genutzt.



## 4 Material und Methoden

### 4.1 Datengrundlage der Modellsimulationen

Das Ökosystemmodell MONICA wurde zur Abschätzung der ökologischen Folgewirkungen des Energiepflanzenanbaus in den Verbundprojekten EVA ('Entwicklung und Vergleich von optimierten Anbausystemen für die landwirtschaftliche Produktion von Energiepflanzen unter verschiedenen Standortbedingungen Deutschlands', Laufzeit: 2005 – 2008) und dessen Nachfolger EVA 2 ('Standortangepasste Anbausysteme für die Produktion von Energiepflanzen', Laufzeit: 2009 – 2012) eingesetzt (Vetter et al. 2011). Die Daten dieser Projekte wurden zur Durchführung der Sensitivitätsanalysen und zur Parametrisierung des Modells genutzt. Im Mittelpunkt der EVA-Projekte standen verschiedene Fruchtfolgen-Experimente, bei denen der Anbau von Marktfrüchten und Energiepflanzen kombiniert wurde. MONICA wurde zur Bewertung der abiotischen Folgewirkungen des Energiepflanzenanbaus respektive des Stickstoffaustrags und der Grundwasserneubildung eingesetzt.

#### 4.1.1 Versuchsstandorte

Zur Bestimmung der Standortpräferenzen erfolgte die Durchführung von Fruchtfolgeversuchen an acht regional repräsentativen Versuchsstandorten in Deutschland (Tabelle 4.1, Abbildung 4.1). Im EVA-Projekt nahmen die Versuchsstandorte Gülzow, Werlte, Güterfelde, Trossin, Dornburg, Ascha und Ettlingen als Versuchsstandorte teil. Bernburg wurde erst in EVA 2 als Versuchsstandort aufgenommen.

Tabelle 4.1: Bodenkundliche und klimatische Eigenschaften der Versuchsstandorte. Gemittelte Werte der Versuchsstandorte der Jahre 2005-2011.

Standort	Klima		Boden			
	Jahresniederschlag [mm]	Mittl. Jahrestemperatur [°C]	Bodenart	pH-Wert	Trockenrohdichte [g cm <sup>-3</sup> ]	C <sub>org</sub> [%]
Ascha	1024	8.5	Sandiger Lehm	5.2	1.7	0.4
Bernburg	734	9.0	Lehmiger Schluff	7.3	1.6	0.7
Dornburg	653	9.0	Toniger Schluff	7.4	1.5	0.4
Ettlingen	880	10.4	Schluffiger Lehm	7.2	1.6	0.4
Gülzow	740	9.4	Lehmiger Sand	6.8	1.7	0.5
Güterfelde	600	10.1	Lehmiger Sand	6.3	1.7	0.2
Trossin	806	9.7	Lehmiger Sand	5.1	1.8	0.3
Werlte	872	9.8	Lehmiger Sand	4.8	1.7	0.4



Abbildung 4.1: Versuchsstandorte der EVA-Projekte.

#### 4.1.2 Fruchtfolge-Experimente

Die Fruchtfolge-Experimente setzten sich aus fünf Standardfruchtfolgen und drei – teilweise auch vier – Regionalfruchtfolgen zusammen. Die Standardfruchtfolgen (Tabelle 4.2) wurden an jedem Versuchsstandort – unter Berücksichtigung individueller Standortansprüche und guter fachlicher Praxis – gleichermaßen angebaut. Zielstellung der Versuche war die Identifikation der für den Energiepflanzenanbau optimalen Fruchtfolge an einem Standort sowohl aus ökologischer als auch ökonomischer Sicht. Die in Regionalfruchtfolgen kultivierten Fruchtarten wurden von den Versuchsanstellern unabhängig voneinander festgelegt (Tabellen 4.3 und 4.4). Deshalb unterscheiden sich die Regionalfruchtfolgen an jedem Standort. Zur Reduktion des klimatischen Einflusses auf die Experimente wurden die Fruchtfolgeversuche der EVA-Versuche an jedem Standort im Folgejahr wiederholt durchgeführt.

Tabelle 4.2: Fruchtarten der Standardfruchtfolgen des Grundversuches der zwei EVA-Projekte (S=Sommer, W=Winter). Der Anbau der Standardfruchtfolgen erfolgte an allen Versuchsstandorten.

<b>EVA (2005-2008)</b>				
	<b>2005</b>	<b>2006</b>	<b>2007</b>	<b>2008</b>
<b>FF01</b>	S.Gerste, Ölrettich	Mais	W.Triticale, Zuckerhirse	W.Weizen *
<b>FF02</b>	Sudangras	W.Roggen, Mais	W.Triticale	W.Weizen *
<b>FF03</b>	Mais	W.Roggen, Sudangras	W.Triticale, Einj. Weidelgras	W.Weizen *
<b>FF04</b>	S.Gerste, Luzerne-/ Klee gras	Luzerne-/ Klee gras	Luzerne-/ Klee gras	W.Weizen *
<b>FF05</b>	Hafer	W.Triticale	W.Raps	W.Weizen *
<b>EVA 2 (2009-2012)</b>				
	<b>2009</b>	<b>2010</b>	<b>2011</b>	<b>2012</b>
<b>FF01</b>	W.Gerste, Sudangras	Mais	W.Triticale, Phacelia	W.Weizen *
<b>FF02</b>	Sudangras	W.Roggen, Mais	W.Triticale	W.Weizen *
<b>FF03</b>	Mais	W.Roggen, Sudangras	W.Triticale, Einj. Weidelgras	W.Weizen *
<b>FF04</b>	S.Gerste, Luzerne-/ Klee gras	Luzerne-/ Klee gras	Luzerne-/ Klee gras	W.Weizen *
<b>FF05</b>	Hafer	W.Triticale	W.Raps	W.Weizen *

\* In Güterfelde und Trossin wurden aufgrund der besseren Anbaueignung anstelle von W.Weizen W.Roggen angebaut.

Tabelle 4.3: Regionalfruchtfolgen des ersten EVA-Projekts.

	2005	2006	2007	2008
<b>Ascha</b>				
<b>FF06</b>	Mais	W.Roggen, Mais	W.Roggen-W.Wicken, Sudangras	W.Weizen
<b>FF07</b>	Mais	W.Weizen	W.Raps, Sudangras	W.Weizen
<b>FF08</b>	Mais, Welsches Weidelgras	Welsches Weidelgras, Kartoffeln	W.Weizen, Erbse	W.Weizen
<b>Dornburg</b>				
<b>FF06</b>	Hafer	W.Gerste-W.Triticale- W.Weizen	W.Raps	W.Weizen
<b>FF07</b>	Mais	Mais	Mais	W.Weizen
<b>FF08</b>	Topinambur	Topinambur	Topinambur	W.Weizen
<b>Ettlingen</b>				
<b>FF06</b>	Zuckerhirse	W.Gerste, Sudangras	W.Raps, Hafer	W.Weizen
<b>FF07</b>	Sonnenblumen	W.Triticale, Zuckerhirse	Mais	W.Weizen
<b>FF08</b>	Mais	W.Roggen, Mais	Mais	W.Weizen
<b>Gülzow</b>				
<b>FF06</b>	Mais	Gerstgras	W.Raps	W.Weizen
<b>FF07</b>	Mais	W.Roggen, Welsches Weidelgras	Welsches Weidelgras	W.Weizen
<b>FF08</b>	S.Roggen-S.Triticale	W.Raps	W.Weizen	W.Weizen
<b>Güterfelde</b>				
<b>FF06</b>	Senf, S.Roggen	Lupine	Zuckerhirse, W.Roggen	W.Roggen
<b>FF07</b>	Ölrettich, Sonnenblume	Erbse	Zuckerhirse, W.Triticale	W.Roggen
<b>FF08</b>	Topinambur	Topinambur	Topinambur	W.Roggen
<b>FF09</b>	Erbse-Hafer-Leindotter	Buchweizen, W.Raps	Sudangras, W.Roggen	W.Roggen
<b>Trossin</b>				
<b>FF06</b>	S.Roggen	S.Raps, Landsberger Gemenge	Landsberger Gemenge, Sudangras	W.Roggen
<b>FF07</b>	Mais	W.Roggen, Zuckerhirse	Kartoffeln	W.Roggen
<b>FF08</b>	S.Triticale, Senf	Sonnenblumen, Phacelia	Hanf	W.Roggen
<b>Werlte</b>				
<b>FF06</b>	Mais	W.Roggen, Mais	W.Roggen, Mais	W.Weizen
<b>FF07</b>	Mais	W.Triticale	W.Gerste	W.Weizen
<b>FF08</b>	Mais	W.Weizen	W.Roggen	W.Weizen



Tabelle 4.4: Regionalfruchtfolgen in EVA 2.

	2009	2010	2011	2012
<b>Ascha</b>				
<b>FF06</b>	Bastardweidelgras	W.Roggen, Mais	W.Roggen-W.Wicken, Buchweizen Phacelia	W.Weizen
<b>FF07</b>	W.Gerste-W.Rübsen	W.Weizen	W.Raps, Buchweizen	W.Weizen
<b>FF08</b>	W.Roggen-W.Wicken	Welsches Weidelgras	W.Weizen, Erbse	W.Weizen
<b>Bernburg</b>				
<b>FF06</b>	Mais	Mais	Mais	W.Weizen
<b>FF07</b>	W.Roggen, Mais	W.Roggen, Mais	W.Roggen, Mais	W.Weizen
<b>FF08</b>	Zuckerhirse	Zuckerhirse	Zuckerhirse	W.Weizen
<b>Dornburg</b>				
<b>FF06</b>	Hafer	W.Gerste-W.Triticale- W.Weizen	W.Raps	W.Weizen
<b>FF07</b>	Mais	Mais	Mais	W.Weizen
<b>FF08</b>	Topinambur	Topinambur	Topinambur	W.Weizen
<b>Ettlingen</b>				
<b>FF06</b>	Zuckerhirse	W.Gerste, Sudangras	W.Raps, Mais	W.Weizen
<b>FF07</b>	Sonnenblumen	W.Triticale, Zuckerhirse	Zuckerrüben	W.Weizen
<b>FF08</b>	Mais	W.Roggen, Mais	Mais	W.Weizen
<b>Gülzow</b>				
<b>FF06</b>	Mais	Gerstgras	W.Raps	W.Weizen
<b>FF07</b>	Mais	W.Roggen, Welsches Weidelgras	Welsches Weidelgras	W.Weizen
<b>FF08</b>	W.Roggen-W.Triticale	W.Raps	W.Weizen	W.Weizen
<b>Güterfelde</b>				
<b>FF06</b>	W.Roggen, Senf	Mais	Sudangras	W.Roggen
<b>FF07</b>	Sonnenblume, Senf	Erbse	Mais, W.Roggen	W.Roggen
<b>FF08</b>	Zuckerhirse	W.Roggen, Biomax	Mais	W.Roggen
<b>FF09</b>	Mais	W.Roggen	Sudangras, W.Roggen	W.Roggen
<b>Trossin</b>				
<b>FF06</b>	W.Gerste	W.Raps	Landsberger Gemenge, Sudangras	W.Roggen
<b>FF07</b>	Mais	W.Roggen, Zuckerhirse	Kartoffeln	W.Roggen
<b>FF08</b>	W.Gerste, Senf	Sonnenblume, Phacelia	Zuckerrüben	W.Roggen
<b>Werlte</b>				
<b>FF06</b>	W.Roggen, Mais	W.Roggen, Mais	W.Roggen, Mais	W.Weizen
<b>FF07</b>	Mais	W.Triticale	W.Gerste	W.Weizen
<b>FF08</b>	Mais	W.Weizen	W.Roggen	W.Weizen

### 4.1.3 Messdaten

Die Versuche wurden mit einem umfassenden Messkonzept begleitet. Während des Anbaus der Fruchtfolgen erfolgten wiederholte Messungen zu Biomasse, N-Nährstoffkonzentration, Bestandesdichte und -höhe. Weiterhin wurden regelmäßig Beprobungen des Bodens zur Messung des Wasser- und  $N_{\min}$ -Gehalts durchgeführt. In dieser Arbeit standen Messwerte zu den in Tabelle 4.5 spezifizierten Outputs zur Verfügung. Die Werte von *Yield* und *NConc* bezogen sich auf den zum Erntezeitpunkt erhobenen Messwert. Proben von *Above-Ground Biomass (AGB)* und *Height* wurden zu mehreren Zeitpunkten während der Pflanzenentwicklung erhoben. Bodenbeprobungen zu Messungen des Wasser- und  $N_{\min}$ -Gehalts erfolgten ebenfalls mehrmals im Jahr.

Die Daten der EVA-Versuche werden in einer zentralen MySQL-Datenbank verwaltet. Die Datenbank umfasst Informationen zum Anbau der Fruchtfolgen, Standort, Boden und Wetter. Die erforderlichen Daten zur Durchführung einer Simulation werden von MONICA direkt über die eigens entwickelte Schnittstelle zur EVA-Datenbank ausgelesen (siehe Abschnitt 3.2).

Tabelle 4.5: Überblick über die für die Parametrisierung zur Verfügung stehenden Messwerte der EVA-Projekte.

Output	Beschreibung	Einheit
AGB	Oberirdische Biomasse	[t ha <sup>-1</sup> ]
Yield	Hauptertrag (Korn)	[t ha <sup>-1</sup> ]
NConc	N-Konzentration in der oberirdischen Trockenmasse	[kg N ha <sup>-1</sup> ]
Height	Pflanzenhöhe	[m]
Moist <sub>30</sub>	Wassergehalt in 0-30 cm Tiefe	[Vol-%]
Moist <sub>60</sub>	Wassergehalt in 30-60 cm Tiefe	[Vol-%]
Moist <sub>90</sub>	Wassergehalt in 60-90 cm Tiefe	[Vol-%]
Nmin <sub>30</sub>	$N_{\min}$ -Gehalt in 0-30 cm Tiefe	[kg N ha <sup>-1</sup> ]
Nmin <sub>60</sub>	$N_{\min}$ -Gehalt in 30-60 cm Tiefe	[kg N ha <sup>-1</sup> ]
Nmin <sub>90</sub>	$N_{\min}$ -Gehalt in 60-90 cm Tiefe	[kg N ha <sup>-1</sup> ]

## 4.2 Sensitivitätsanalyse

Die Sensitivitätsanalyse (SA) ist ein wichtiges Werkzeug während der Entwicklung eines Modells. Durch Untersuchungen der Änderungen des Modelloutputs aufgrund der Variation von Modelleingangsgrößen wird zum einen das erwartete Modellverhalten überprüft, zum anderen werden so wesentliche Modellparameter mit hohem Einfluss auf das Modellergebnis identifiziert (Wallach et al. 2006).

Der Einsatz globaler, quantitativer SA-Verfahren für komplexe Modelle basierend auf Monte-Carlo-Simulationen ist aufgrund des hohen Rechenaufwands nur bedingt möglich. Bei einer langen Simulationszeit des Modells ist die Anzahl der zu untersuchenden Parameter bei Monte-Carlo basierten SA zu minimieren. Durch Realisierung einer Rastersuche (*Screening*) eines Modells ist eine Identifizierung relevanter Parameter auf Basis weniger Modellsimulationen möglich. Da-

durch kann die Anzahl der durchzuführenden Simulationen quantitativer, Monte-Carlo basierter Verfahren durch Limitierung der SA auf relevante Parameter reduziert werden (Saltelli 2008).

Aus diesem Grund wurde bei der Untersuchung des Agrarökosystemmodells MONICA zuerst die globale, rasterbasierte Screening-Methode nach Morris als Voruntersuchung der Parameter eingesetzt. Basierend auf der qualitativen Bewertung der Parameter durch das Morris-Verfahren wurde die Sensitivität der als relevant identifizierten Parameter durch Berechnung komplexer Sensitivitätsmaße, dem Haupt- und Totaleffekt, der Extended FAST-Methode bestimmt.

Das Ziel der für MONICA durchgeführten SA war die Identifizierung relevanter Modellparameter, die in einer späteren Kalibrierung des Modells angepasst wurden. Weiterhin wurden durch die Identifikation von Modellparametern ohne Einfluss auf ein Modelloutput Möglichkeiten zur Vereinfachung des Modells aufgezeigt. Die Kalibrierung kann durch das Konstantsetzen nicht relevanter Parameter deutlich vereinfacht werden (Wallach et al. 2006).

#### 4.2.1 Das Screening-Design nach Morris

Die Morris-Methode (Morris 1991) ist eine rasterbasierte Screening-Methode, die den gesamten Wertebereich der Parameter untersucht. Charakterisierend für die Morris-Methode ist die Unterteilung des Parameterwertebereichs in ein Raster. Modellsimulationen werden nur für Punkte, die Teil des Rasters sind, durchgeführt. Aufgrund dieser Rastersuche werden im Vergleich zu Monte-Carlo basierten Verfahren nur wenige Modellsimulationen benötigt. Neben der Identifikation der einflussreichsten Modellparameter ermöglicht die Morris-Methode die Analyse der Interaktionen zwischen Parametern sowie die Identifikation nicht-linearer Zusammenhänge von Parametern und Modelloutputs. Ziel des Verfahrens ist die Erstellung eines qualitativen Rankings der Modellparameter.

Der Wertebereich der Modellparameter wird in ein  $p$ -stufiges Raster ( $\Omega$ ) unterteilt. In Morris (1991) wird zur Unterteilung des Untersuchungsraums eine Gleichverteilung der Parameter angenommen. Als Sensitivitätsmaß stellt Morris die sogenannten Elementaren Effekte (EE) vor, die das Verhältnis der Änderung des Outputs in Bezug zur Variation des Inputs zwischen zwei Punkten des Untersuchungsraum beschreiben. Der Elementare Effekte (EE) des  $i$ ten Parameters berechnet sich aus

$$EE_i = \frac{[f(x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x_i + \Delta, x_{i+1}, \dots, x_n) - f(x_1, x_2, \dots, x_n)]}{\Delta} \quad (4.1)$$

mit der Ausgangsgröße  $y = f(x)$  und den  $n$  Eingangsparametern  $x_i$ . Die Schrittweite  $\Delta \in \{\frac{1}{p-1}, \frac{1}{p-1}, \dots, 1 - \frac{1}{p-1}\}$  zur Untersuchung des Parameterraums wird vorgegeben.  $p$  stellt dabei die Anzahl der zu berücksichtigenden Stufen des Rasters dar. Die Wahl von  $p$  und  $\Delta$  ist in Abhängigkeit von der Anzahl der Parameter und den verfügbaren Simulationsdurchläufen zu definieren. Je feiner die Unterteilung des Rasters und je kleiner die Schrittweite, desto mehr Modellsimulationen sind zur größtmöglichen Abdeckung des Parameterraums erforderlich. In Saltelli (2008) werden Empfehlungen zur Festlegung von  $p$  und  $\Delta$  gegeben.

Zur Erstellung von Stichproben werden  $j$  zufällig ermittelte Startpunkte (Trajekturen) aus dem Untersuchungsraum  $\Omega$  ausgewählt. Für jeden dieser Startpunkte wird nun ein zufällig gewählter Eingangsparameter  $x_i$  verändert, so dass der neue Punkt ebenfalls Teil des Parameterraums ( $x_i + \Delta \in \Omega$ ) ist. Die Schritttrichtung zur Erzeugung des neuen Punktes wird ebenfalls zufällig

ausgewählt. Nach jeder Änderung eines Parameters wird der resultierende EE berechnet. Dieser Prozess wird für jeden untersuchten Parameter wiederholt. Das Resultat stellt eine Verteilung von EEs für jeden Modellparameter dar. Der zugehörige Rechenaufwand ist dabei von der Größenordnung  $\mathcal{O}(j \cdot (n + 1))$ .

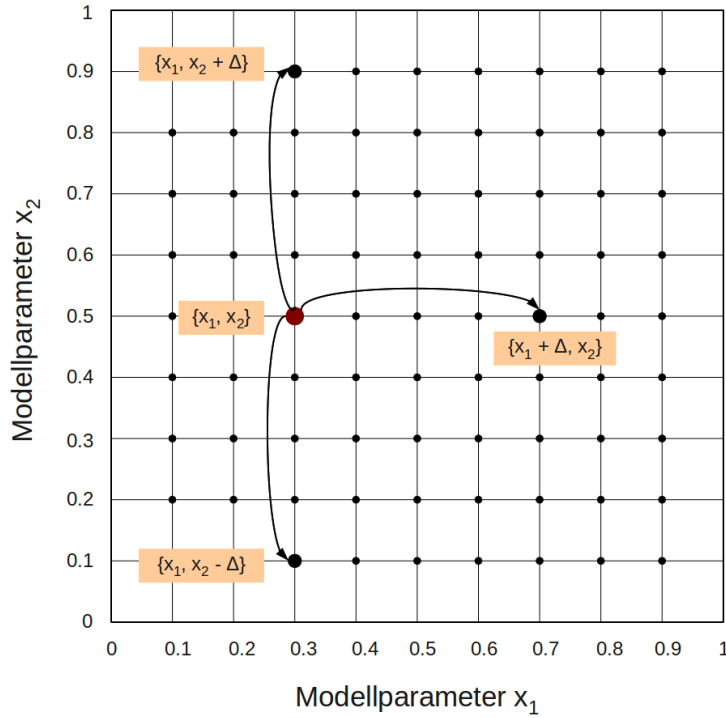


Abbildung 4.2: Beispiel eines rasterbasierten Untersuchungsraums der Morris-Methode für zwei Parameter  $x_1$  und  $x_2$ .

In Abbildung 4.2 ist exemplarisch der Untersuchungsraum zweier gleichförmig verteilter Modellparameter ( $x_1 \in [0; 1]$ ,  $x_2 \in [0; 1]$ ) für  $p = 11$  und  $\Delta = 4/10$  dargestellt. Für einen ausgewählten Punkt des Rasters  $\{x_1, x_2\}$  sind die möglichen Schritttrichtungen abgebildet, die bei Variation eines Parameters um die Schrittweite  $\Delta$  zur Verfügung stehen.

Campolongo et al. (2007) stellen eine Weiterentwicklung der Morris-Methode vor, indem sie das Verfahren zur Bestimmung der Startwerte optimieren. Anstelle einer zufälligen Bestimmung von Startwerten werden diese so ausgewählt, dass eine möglichst große Abdeckung des Parameter-raums erreicht wird. Aus einer hohen Anzahl  $M$  an Startwerten wird basierend für jedes Startwertepaar  $(m_s, m_t)$  der Abstand  $d_{st}$  berechnet.

$$d_{st} = \sum_{i=0}^n \sum_{l=0}^n \sqrt{\sum_{z=0}^{n-1} [x_{z,i}(m_s) - x_{z,l}(m_t)]^2} \quad (4.2)$$

Aus den Kombinationsmöglichkeiten  $\binom{M}{j}$  werden  $j$  Startpunkte (Trajekturen) mit dem größtmöglichen Abstand zueinander ausgewählt.

Auf Basis der EE-Verteilung werden als Sensitivitätsmaße der Mittelwert ( $\mu$ ) und die Standardab-

weichung ( $\sigma$ ) berechnet:

$$\mu_i = \frac{1}{j} \sum_{r=1}^j EE_{i,r} \quad (4.3)$$

$$\sigma_i = \sqrt{\frac{1}{j-1} \sum_{r=1}^j (EE_{i,r} - \mu_i)^2} \quad (4.4)$$

Campolongo et al. (2007) präsentieren ein weiteres Sensitivitätsmaß  $\mu^*$ , welches, basierend auf den Absolutbeträgen der EEs, den Mittelwert der Verteilung berechnet. Diese Erweiterung verhindert die Bewertung relevanter Parameter als irrelevant, da eine Aufhebung von Effekten durch vorzeichenbehaftete EEs unterbunden wird.

$$\mu_i^* = \frac{1}{j} \sum_{r=1}^j |EE_{i,r}| \quad (4.5)$$

Der Mittelwert  $\mu_i$  bzw.  $\mu_i^*$  quantifiziert die Veränderung des Modelloutputs  $y$ , der bei Variation des Parameters  $x_i$  zu erwarten ist. Ein hoher Mittelwert  $\mu_i$  der EE-Verteilung deutet auf eine Sensitivität des Modellparameters  $x_i$  bezogen auf  $y$  hin. Die Standardabweichung quantifiziert Interaktionseffekte von Parametern. Eine hohe Standardabweichung  $\sigma$  ist entweder ein Zeichen für eine Wechselwirkung mit anderen Parametern, oder aber verweist auf einen nicht-linearen Einfluss auf  $y$ . Eine kleine Standardabweichung deutet darauf hin, dass die Veränderung von  $y$  unabhängig von den Werten anderer Parameter ist.

Basierend auf den Erkenntnissen von Sin and Gernaey (2009) wurde in dieser Arbeit eine Skalierung der EEs durchgeführt, die den Vergleich von Parametern mit unterschiedlichen Wertebereichen erlaubt.

## 4.2.2 Extended FAST

Die Extended Fourier Amplitude Sensitivity Test (Extended FAST) zählt zu den varianzbasierten SA-Verfahren, bei denen die Abhängigkeit der Varianz des Modelloutputs von der Varianz der Modellparameter untersucht wird. Die Varianz des Outputs wird dabei in Varianzen, die durch einzelne Modellparameter verursacht werden, zerlegt. Die Grundlagen dieser Methode wurden von Cukier et al. (1973, 1975) entwickelt und von Saltelli et al. (1999) weiterentwickelt.

Im Folgenden wird eine kurze Darstellung der Methode gegeben, jedoch sei für vertiefende Informationen auf Cukier et al. (1973, 1975) und Saltelli et al. (2000) verwiesen. Als Samples werden die Punkte des Untersuchungsraums bezeichnet, für die im Rahmen der SA Modellsimulationen durchgeführt wurden.

### 4.2.2.1 Erzeugung der Parameter-Samples

Bei der Extended FAST wird der Wertebereich der Parameter mittels einer periodischen Transformationsfunktion untersucht. Dabei wird jedem Parameter  $x_i$  eine eindeutige, ganzzahlige Frequenz  $\omega_i$  zugewiesen. In Saltelli et al. (2000) werden Beispiele für verschiedene Transformationsfunktionen vorgestellt. In dieser Arbeit wurde die Funktion von Saltelli et al. (1999) verwendet. Der

Wert eines Parameters  $x_i$  ( $x_i \in [0; 1]$ ) wird durch

$$x_i = 0.5 + \frac{1}{\pi} \arcsin[\sin(\omega_i s + \varphi_i)] \quad (4.6)$$

berechnet, mit  $s$  als skalare Variable, wobei  $s \in [-\pi, \pi]$  gilt.  $\varphi_i$  mit  $\varphi_i \in [0, 2\pi]$  ist ein zufällig gewählter Wert zur Definition einer Phasenverschiebung, die den Startpunkt der Suchkurve festlegt.  $\omega_i$  ( $i = 1, \dots, k$ ) ist die individuelle Frequenz des  $i$ -ten Parameters, wobei  $\omega_i$  so gewählt wird, dass es kein Vielfaches der Frequenz eines anderen Parameters ist. Unabhängig von der Wahl der Suchfunktion wird mit der Variation des Parameters  $s$  von  $-\pi$  bis  $\pi$  eine Abdeckung des mehrdimensionalen Wertebereichs der Modellparameter erreicht. Jede Eingangsgröße  $x_i$  oszilliert dabei periodisch entsprechend ihrer Frequenz  $\omega_i$ .

In Abbildung 4.3 (a) ist die Suchkurve zweier Parameter  $x_1$  und  $x_2$ , wobei  $x_1 \in [0; 1]$ ,  $\omega_{x_1} = 23$ ;  $x_2 \in [0; 1]$ ,  $\omega_{x_2} = 29$ , mit ihrer resultierenden empirischen Verteilung dargestellt. Neben der Suchkurve ist die resultierende Verteilung der Parameter abgebildet. Durch die ausgewählte Transformationsfunktion nach Saltelli et al. (2000) wird eine Gleichverteilung in den erzeugten Parametersamples erreicht. Abbildung 4.3 (b) zeigt die resultierende Abdeckung des Parametersuchraums, die sich durch die Abtastung mit der Transformationsfunktion für  $x_1$  und  $x_2$  ergibt.

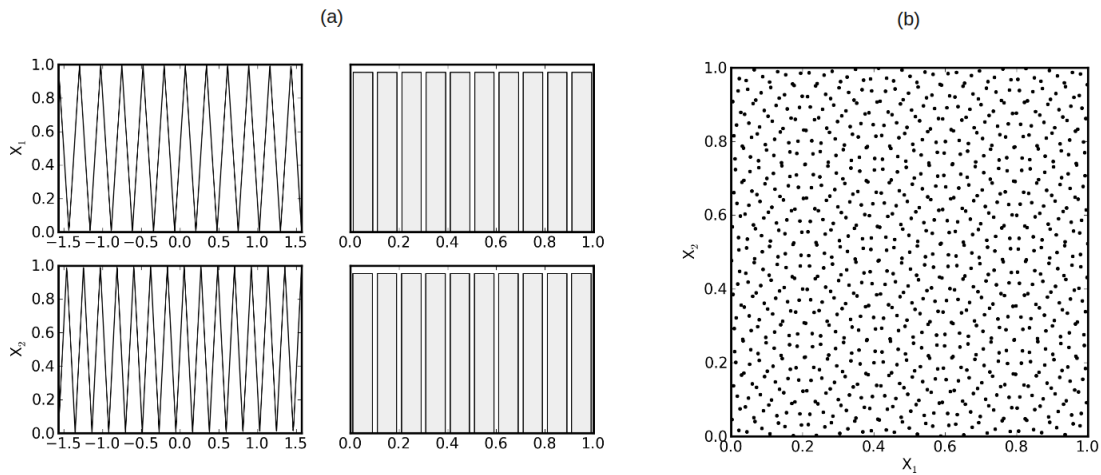


Abbildung 4.3: (a) Suchfunktionen zweier Parameter  $x_1$  und  $x_2$ . (b) Resultierende Abdeckung des Parametersuchraums durch Erzeugung von Samples für  $x_1$  und  $x_2$ .

#### 4.2.2.2 Berechnung der Sensitivitätsmaße

Auf Basis der Transformationsfunktion und der individuell festgelegten Integer-Frequenzen  $\omega_i$  der Modellparameter werden  $N$  Samples erzeugt. Für jedes Sample wird eine Modellsimulation durchgeführt. Aufgrund der Periodizität des Modelloutputs wird dieser mittels einer Fouriertransformation spektral ausgewertet (Cukier et al. 1973).

$$f(x_1, \dots, x_k) = f(s) = A_0 + \sum_{k=1}^{\infty} [A_k \cos(k \cdot s) + B_k \sin(k \cdot s)] \quad (4.7)$$

Die Fourier-Koeffizienten  $A_k$  und  $B_k$  werden wie folgt bestimmt:

$$A_0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(s) ds \quad (4.8)$$

$$A_j = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(s) \cos(k \cdot s) ds \quad (4.9)$$

$$B_j = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(s) \sin(k \cdot s) ds. \quad (4.10)$$

Nach Saltelli et al. (2000) berechnet sich die Gesamtvarianz  $D$  aus

$$D = 2 \sum_{k=1}^{\infty} A_k^2 + B_k^2. \quad (4.11)$$

Die anteilige Varianz  $D_i$ , die sich aus der Variation des Parameters  $x_i$  ergibt, wird aus der Summe der Amplituden des Spektrums mit der Frequenz  $\omega_i$  und deren Harmonischen  $k\omega_i$  bestimmt.

$$D_i = 2 \sum_{k=1}^M (A_{k\omega_i}^2 + B_{k\omega_i}^2) \quad (4.12)$$

$k\omega_i$  ist die harmonische Frequenz der individuellen Integer-Frequenz  $\omega_i$  des Parameters  $x_i$  mit  $k = 1, 2, \dots, M$ .  $M$  symbolisiert die maximale, zu berücksichtigende harmonische Frequenz, wobei Cukier et al. (1975) die Wahl von  $M = 4$  empfehlen.

Auf Basis der Ergebnisse der spektralen Analyse erfolgt die Berechnung der zwei Sensitivitätsmaße *Haupteffekt* und *Totaleffekt*.

#### Haupteffekt

Der Haupteffekt  $S_i$  quantifiziert den Anteil der Modellparametervarianz an der Gesamtvarianz des Outputs. Er charakterisiert den direkten Einfluss eines Parameters auf den Modelloutput. Er wird durch

$$S_i = \frac{D_i}{D} \quad (4.13)$$

approximiert (Saltelli et al. 2000).

#### Totaleffekt

Im Gegensatz zum Haupteffekt berücksichtigt der Totaleffekt zusätzliche Wechselwirkungseffekte zwischen Parametern (Saltelli et al. 1999). Der Totaleffekt  $S_{T_i}$  berechnet sich aus

$$S_{T_i} = \frac{D - D_{\bar{i}}}{D} \quad (4.14)$$

wobei

$$D_{\bar{i}} = 2 \sum_{k=1}^M (A_{k\omega_{\bar{i}}}^2 + B_{k\omega_{\bar{i}}}^2) \quad (4.15)$$

die Summe aller Varianzterme ausgenommen der harmonischen Frequenzen  $k\omega_i$  von  $x_i$  ist (Saltelli et al. 2000).

### 4.2.3 Korrelationen von Modellparametern

Sowohl die Berechnungen der elementaren Effekte der Morris-Methode (Kapitel 4.2.1) als auch die Berechnung der Haupt- und Totaleffekte der Extended FAST (Kapitel 4.2.2.2) setzen unabhängige Modellparameter voraus (Saltelli et al. 2000; Schwieger 2005). Sobald Korrelationen zwischen Modellparametern existieren, ist eine Varianzzerlegung in Anlehnung an Formel 2.18 nicht möglich (Schwieger 2005). Bei stochastisch abhängigen Modellparametern kann der Haupteffekt als qualitatives Sensitivitätsmaß verwendet werden, eine quantitative Aussage ist jedoch nicht möglich (Saltelli 2002). In dieser Arbeit werden aus diesem Grund ausschließlich unkorrelierte Parameter in den SA betrachtet.

Die Entwicklung von SA-Verfahren für Modelle mit korrelierten Eingangsgrößen ist Gegenstand der aktuellen Forschung. Jacques et al. (2006) stellen einen Ansatz vor, bei dem die Modellparameter in Gruppen unterteilt werden. Diese Unterteilung setzt voraus, dass Korrelationen nur innerhalb der Gruppen existieren. Nach der Unterteilung der Modellparameter werden die Sensitivitätsmaße für einzelne Gruppen bestimmt. Weitere Ansätze zur Berechnung verschiedener Sensitivitätsmaße auch bei abhängigen Modellparametern werden in Kucherenko et al. (2012), Pan et al. (2011), Mara and Tarantola (2012) und Xu and Gertner (2007) vorgestellt.

### 4.2.4 Implementierung

#### 4.2.4.1 Softwaretechnische Realisierung

Vor der Realisierung der SA wurden zunächst bestehende Software-Tools, die verschiedene SA-Methoden unterstützen, recherchiert. Hauptkriterien für die Durchführung der SA an den SA-Tools waren

1. die Ausführbarkeit unter Linux,
2. die Unterstützung von MPI zur parallelen Durchführung der SA auf dem ZALF Rechnercluster und
3. die Implementierung der Morris- und Extended FAST-Methode.

Weiterhin wurden überprüft, welche Schnittstelle die Tools zur Kommunikation mit MONICA bereitstellen, die Verfügbarkeit einer GUI (*Graphical user interface*) sowie die Möglichkeit zur Visualisierung von Ergebnissen. Tabelle 4.6 gibt einen Überblick über die recherchierten Tools und deren Eigenschaften.

Als erstes SA-Tool wurde *SimLab* (JRC 2011) des *Joint Research Centre (Ispra, Italien)*, untersucht. *SimLab* (Version 3.2) ist eine freie Entwicklungsumgebung für Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen. Die Software wird auf verschiedenen Windows- und Linux-Plattformen unterstützt. Zur Kommunikation mit anderen Modellen werden in *SimLab* zum einen Schnittstellen zu Programmiersprachen wie C++, Fortran oder Matlab bereit gestellt, zum anderen besteht die Möglichkeit zur Kommunikation über separate Dateien. Die Verwendung der Datei-basierten Schnittstelle



Tabelle 4.6: Vergleich von bestehenden Software-Tools zur Durchführung der SA.

	<b>SimLab</b>	<b>SimEnv</b>	<b>DAKOTA*</b>
<b>Hersteller</b>	Joint Research Center, Ispra	PIK, Potsdam	Sandia National Labs, Albuquerque
<b>Version</b>	3.2 (2009)	2.11 (2010)	5.1 (2010)
<b>Plattform</b>	Windows, Linux (Matlab)	Linux	Windows, Linux (Redhat 4, 5, 6)
<b>MPI</b>	—	✓	✓
<b>Morris</b>	✓	✓	✓
<b>Extended FAST</b>	✓	—	—
<b>Modell- Interface</b>	Matlab, C++, Fortran, Datei	C++, Fortran, Java, Python, Matlab, Mathematica, GAMS	C++, Datei
<b>GUI</b>	—	✓	✓
<b>Ergebnis- visualisierung</b>	—	✓	✓
<b>URL</b>	<a href="http://simlab.jrc.ec.europa.eu">http://simlab.jrc. ec.europa.eu</a>	<a href="http://www.pik-potsdam.de/software/simenv/">http://www. pik-potsdam.de/ software/simenv/</a>	<a href="http://dakota.sandia.gov/index.html">http: //dakota.sandia. gov/index.html</a>

\* Design Analysis Kit for Optimization and Terascale Applications

erfordert jedoch eine Anpassung des Modells, da das von SimLab unterstützte Dateiformat vom Modell eingelesen werden muss. Da SimLab keine Unterstützung von MPI aufweist und somit eine Ausnutzung der Rechenleistung des ZALF Rechner-Clusters nicht möglich ist, war SimLab zur Durchführung der SA von MONICA nicht geeignet.

Nach SimLab erfolgte die Eignungsprüfung der Software *SimEnv* (PIK 2011) des *Potsdam-Instituts für Klimafolgenforschung (PIK)*. *SimEnv* ist eine parallel ausführbare Simulationsumgebung zur Evaluierung komplexer Modelle. Verschiedene lokale und globale SA-Methoden werden von *SimEnv* unterstützt. Das Programm stellt verschiedene Schnittstellen zur direkten Anbindung an ein Modell bereit. Aktuell wird nur die Linux-Plattform unterstützt, die Entwicklung einer Windows-Version ist geplant. Ein Vorteil von *SimEnv* ist zum einen die Unterstützung von MPI, zum anderen die Bereitstellung einer GUI sowie Möglichkeiten zur Ergebnis-Visualisierung. Da jedoch die Extended FAST-Methode nicht implementiert ist, wurde *SimEnv* nicht zur Untersuchung des MONICA-Modells eingesetzt.

*DAKOTA* (Adams et al. 2009) der *Sandia National Labs (Albuquerque, USA)* ist ein ebenfalls parallel ausführbares, objekt-orientiertes Framework zur Parameterschätzung, Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse. Es werden sowohl diverse Windows- als auch Linux-Plattformen unterstützt. Neben der Fähigkeit zur Nutzung von MPI besitzt *DAKOTA* auch eine einfache Benutzeroberfläche, die grundlegende Auswertungen ermöglicht. Da jedoch auch dieses Framework die Extended

FAST-Methode nicht implementiert, war auch DAKOTA zur Durchführung der SA dieser Arbeit nicht geeignet.

Da keine der untersuchten SA-Tools alle erforderlichen Kriterien erfüllte, wurden die relevanten SA-Methoden sowie die Berechnungen der Sensitivitätsindizes selbst implementiert. Eine wesentliche Bedingung bei der Implementierung der SA war zum einen, die Veränderungen und Anpassungen am MONICA-Quellcode so gering wie möglich zu halten. Zum anderen sollte die MPI-fähige Implementierung möglich schnell realisiert werden.

Die Implementierung der SA wurde mit der Programmiersprache Python (Langtangen 2009) durchgeführt. Python ist eine dynamische Skript-Sprache mit zahlreichen Erweiterungen für GUI, Netzwerkkommunikation, Datenbanken, Visualisierungen und statistischen Auswertungen. Python ist Interpreter-basiert, d.h. der Python-Quelltext wird durch einen Compiler in Byte-Code transformiert, der vom Python-Interpreter ausgeführt wird. Python-Programme sind im Vergleich zu kompilierten C/C++-Programmen langsamer. Der Python-Code kann jedoch für die Entwicklung von schnellen und effizienten Programmen mit kompiliertem Code einfach erweitert werden.

Die SA-Methoden zur Untersuchung von MONICA wurden aus diesem Grund in Python realisiert, wobei aus dem Python-Quellcode heraus das kompilierte C/C++ Modell aufgerufen wird. Die langsamere Ausführungszeit des Python-Codes zur Realisierung der SA wirkt sich nur geringfügig auf die Gesamtlaufzeit der SA aus, da die Ausführungszeit der SA im Wesentlichen durch die Simulationszeit des Modells beeinflusst wird. In Nilsen (2007) wurde gezeigt, dass eine parallelisierte Monte-Carlo-Simulation mit Python/C++ annähernd so effizient wie eine reine C++-Realisierung der Simulation ist, und dass der Overhead der Python-Ausführung vernachlässigbar ist.

Zunächst wurde durch die Nutzung von SWIG (Simplified Wrapper Interface Generator, Beazley 2003) eine Schnittstelle realisiert, die den Informationsaustausch zwischen dem Modell und den in Python implementierten SA-Methoden erlaubt. Mittels SWIG können C/C++-Programme mit verschiedenen anderen Hochsprachen wie z.B. Python, Perl, PHP, Tcl oder Ruby kombiniert werden. Die Anwendung von SWIG ermöglicht den direkten Zugriff auf Datenstrukturen von MONICA aus dem Python-Quellcode heraus. SWIG generiert zusätzliche Wrapper-Funktionen auf Basis des MONICA-Quellcodes, die als Schnittstelle zwischen MONICA und Python dienen. Die Wrapper-Funktionen können aus Python heraus aufgerufen werden, so dass Parameter von MONICA ausgelesen bzw. gesetzt und Methoden aufgerufen werden können. Das Erzeugen der Wrapper-Funktionen ist in SWIG voll automatisiert und erforderte nur minimale Anpassungen am Modellquellcode. Durch die von SWIG geschaffene Schnittstelle war es möglich, von Python aus Modellsimulationen zu konfigurieren und zu starten sowie Eingangsfaktoren und Modelldatenstrukturen vor der Simulation zu bearbeiten. Weiterhin konnten durch Nutzung der SWIG-Schnittstelle die Ergebnisse nach Abschluss der Simulation aus dem Modell ausgelesen und in Python weiterverarbeitet werden.

#### 4.2.4.2 Parallelisierung und Speed-Up

Aufgrund der mehrfach notwendigen Modellevaluierungen sowohl bei der Morris-Methode als auch bei der Extended FAST war die Durchführung der SA zeitintensiv. Zur Beschleunigung der Analysen wurden einzelne Rechenschritte unter Verwendung mehrerer Prozessoren des ZALF Rechner-Clusters (Kapitel 4.5) parallel ausgeführt.

Zunächst erfolgte eine Analyse der Verfahren zur Identifizierung der Arbeitsschritte, die eine Pa-

parallelisierung ermöglichen. Nach Ahmdal (1967) besitzt jedes Computerprogramm einen sequentiell und einen parallel ausführbaren Teil. Der sequentielle Teil beinhaltet die Initialisierung der Datenstrukturen, das Einlesen von Daten von der Festplatte oder von Datenbanken. Charakteristisch für den sequentiellen Programmteil ist, dass dieser – auch bei paralleler Ausführung – nicht beschleunigt werden kann. Der parallele Teil eines Programms besteht aus verschiedenen, unabhängigen Operationen, die parallel voneinander ausgeführt werden können. Die gesamte Ausführungszeit  $t_{total}$  eines Computerprogramms setzt sich aus der Summe der Ausführungszeit des sequentiellen und parallelen Teils zusammen. Eine Verringerung der Ausführungszeit eines Programms kann nur für den parallelen Teil erzielt werden.

Die Parallelisierung der SA des MONICA-Modells erforderte eine Anpassung des Quellcodes der implementierten Verfahren. Die Implementierung der Methoden beinhaltete folgende, grundlegende Operationen:

1. Initialisierung und Einlesen der Parameter-Wertebereiche,
2. Definition der Parameter-Samples,
3. Durchführung der Modell-Simulationen und
4. Berechnung der Sensitivitätsmaße.

Der prinzipielle Ablauf der Morris-SA und der Extended FAST war gleich und unterschied sich im Detail in der Erzeugung der Parameter-Samples und in der Berechnung der Sensitivitätsindizes. Aus diesem Grund erfolgte eine analoge Parallelisierung beider Ansätze. Die Durchführung der Modell-Simulationen benötigte die meiste Ausführungszeit. Da die Modell-Simulationen unabhängig voneinander waren und eine separate Ausführung auf mehreren Prozessoren ermöglichten, wurde dieser Arbeitsschritt parallelisiert.

Abbildung 4.4 enthält eine verallgemeinerte Darstellung des Ablaufs bei der Durchführung der SA sowie der realisierten Parallelisierung. Ein Prozessor übernimmt das Einlesen der Parameter-Wertebereiche und die Erzeugung der Parameter-Samples. Die Anzahl der Parameter-Samples wird in gleich große Teilmengen unterteilt und an die übrigen Prozessoren verteilt. Jeder zur Verfügung stehende Prozessor führt daraufhin Modellsimulationen für die empfangenen Parameter-Samples durch. Anschließend werden die Ergebnisse der Evaluierungen an den Hauptprozessor zurückgesendet. Dieser analysiert die Ergebnisse und berechnet anschließend die Sensitivitätsindizes.

Die Parallelisierung erfolgte mittels MPI (Message Passing Interface, Forum 1993). Dabei wurde die Python-Implementierung des MPI-Standards, MPI for Python (Dalcín et al. 2005) eingesetzt. Zur Quantifizierung der durch die Parallelisierung erzielten Beschleunigung der Programmausführungszeit wurde der Speed-Up (Pacheco 2011) ermittelt. Der Speed-Up  $S$  berechnet sich aus

$$S = \frac{t_1}{t_n} \quad (4.16)$$

mit  $t_1$  als Ausführungszeit unter Verwendung eines Prozessors und  $t_n$  als Ausführungszeit unter Verwendung von  $n$  Prozessoren. Die Laufzeit  $t_n$  setzt sich folgendermaßen zusammen

$$t_n = t_s + \frac{t_p}{n} + t_o(p) \quad (4.17)$$

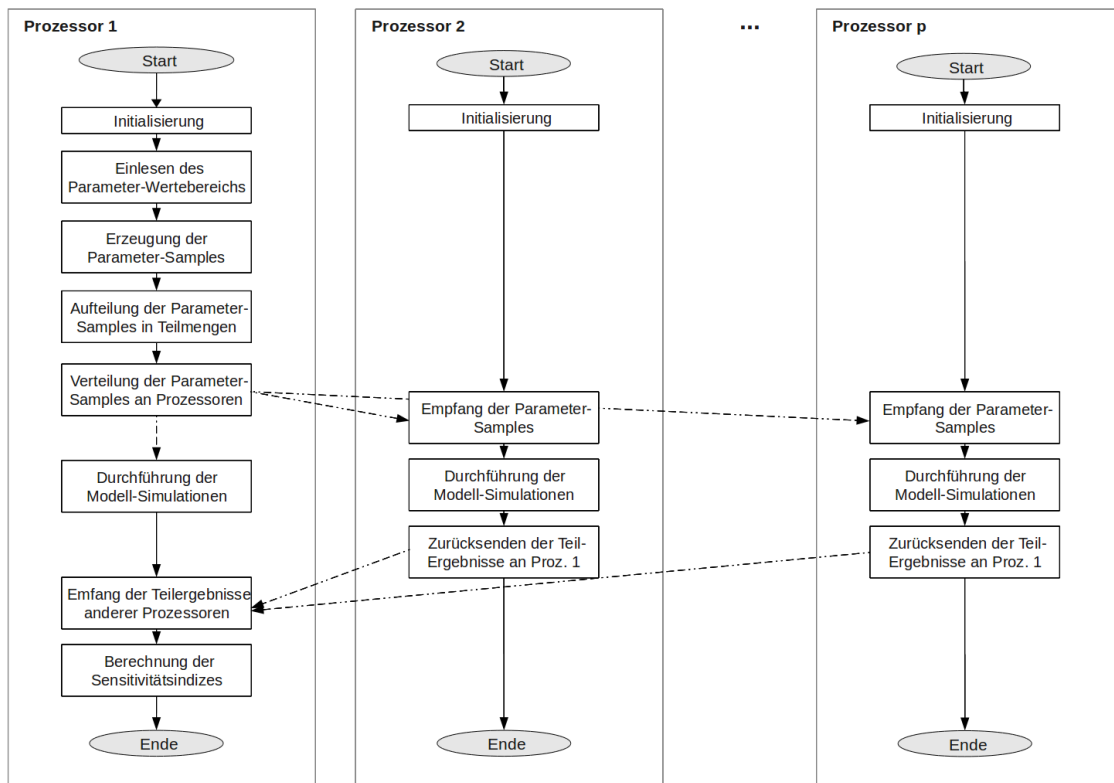


Abbildung 4.4: Schematischer Ablauf der implementierten SA und realisierten Parallelisierung.

mit  $t_s$  als Ausführungszeit des sequentiellen Programmteils,  $t_p$  als Ausführungszeit des parallelen Programmteils,  $n$  als Anzahl der verwendeten Prozessoren, und  $t_o(p)$  als Ausführungszeit der abhängigen Operationen zwischen den Prozessoren.

Optimal wäre bei Verdopplung der Prozessor-Anzahl die Verdopplung des resultierenden Speed-Ups. Aufgrund des sequentiellen Teils eines Computerprogramms, der Kommunikation und dem Datentransfer zwischen den verschiedenen Prozessoren kann ein optimaler Speed-Up nicht erreicht werden (Ahmdal 1967).

### 4.3 Die Optimierungssoftware HOPSPACK

Für die Entwicklung neuer sowie für die Verbesserung bestehender Parametersätze von MONICA wurde die Optimierungssoftware HOPSPACK (Hybrid Optimization Parallel Search Package, Plantenga 2009) eingesetzt. HOPSPACK ist ein auf C++ basierendes Open Source Framework zur Lösung nicht-linearer Optimierungsprobleme, die keine Ableitung benötigen. Das Framework kann im Rahmen der in der GNU Lesser General Public License (GNU L-GPL) festgelegten Bedingungen frei eingesetzt werden.

Durch die Unterstützung von MPI (Message Passing Interface, Forum 1993) und Multi-Threading wird eine parallele Ausführung von HOPSPACK auf Multi-Core und HPC - Rechnern unterstützt. In HOPSPACK ist als Optimierungsverfahren ein Generating Set Search (GSS) - Algorithmus implementiert. Die Software ist jedoch so konzipiert, dass eine Integration weiterer Verfahren einfach durchzuführen ist. Die Bereitstellung einer Datei-basierten Schnittstelle zum Datenaustausch

zwischen Optimierungssoftware und Modell ermöglicht eine einfache Kopplung von HOPSPACK mit anderen Programmen.

#### 4.3.1 Generating Set Search (GSS)

In HOPSPACK ist ein Optimierungsverfahren implementiert, welches zu den Generating Set Search (GSS)-Algorithmen zählt (Kolda et al. 2003). Unter dem Begriff werden verschiedene Optimierungsverfahren zusammengefasst, die das Optimum direkt und ableitungsfrei, durch eine schrittweise Suche im Raum approximieren. GSS-Verfahren werden zur Lösung komplexer wissenschaftlicher und technischer Probleme eingesetzt, für die gradientenbasierte Verfahren nicht eingesetzt werden können. Nachteil dieses Verfahrens ist – im Vergleich zu gradientenbasierten Optimierungsverfahren – die geringe Konvergenzgeschwindigkeit.

Griffin et al. (2008) geben eine detaillierte Beschreibung des in HOPSPACK implementierten, asynchronen GSS-Algorithmus. Das Verfahren ist eine Generalisierung der *pattern search* (Hooke and Jeeves 1961; Torczon 1997), welche sich durch folgenden Ansatz auszeichnet (Algorithmus 1):  $f(x)$  ist die zu minimierende Zielfunktion, mit  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . Ausgehend von einem zufällig gewähltem Startpunkt ( $x_0$ ) im Untersuchungsraum ( $\mathbb{R}^n$ ) wird jede mögliche Richtung ( $d_k \in D_{\oplus}$ ) in einer definierten Schrittweite  $\Delta_k$  untersucht. Führt eine der untersuchten Richtungen zu einer Reduzierung der Zielfunktion, so wird ausgehend von diesem Punkt erneut eine Suche gestartet. Falls keine der untersuchten Richtungen zu einer Verbesserung führt, so wird die Suche mit einer halbierten Schrittweite ( $\Delta_{k+1} = \frac{1}{2}\Delta_k$ ) fortgesetzt. Dieser Prozess wird solange wiederholt, bis die Schrittweite  $\Delta_k$  das zuvor festgelegte Abbruchkriterium ( $\Delta_{tol}$ ) unterschreitet.

---

**Algorithmus 1** Allgemeiner Ansatz der GSS-Verfahren.

---

**Initialisierung.**

Sei  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  gegeben.

Sei  $x_0 \in \mathbb{R}^n$  ein zufällig gewählter Startwert im Untersuchungsraum.

Sei  $\Delta_{tol} > 0$  ein Toleranzwert für den Konvergenztest.

Sei  $\Delta_0 > \Delta_{tol}$  die initiale Schrittweite.

Setze  $k = 0$ .

**while** ( $\Delta_k > \Delta_{tol}$ ) **do**

$k = k + 1$ ;

**if** (Gibt es ein  $d_k \in D_{\oplus}$  mit  $f(x_k + \Delta_k d_k) < f(x_k)$ ) **then**

$x_{k+1} = x_k + \Delta_k d_k$ .

$\Delta_{k+1} = \Delta_k$

**end if**

**if** ( $f(x_k + \Delta_k d_k) \geq f(x_k)$  für alle  $d \in D_{\oplus}$ ) **then**

$x_{k+1} = x_k$

$\Delta_{k+1} = \frac{1}{2}\Delta_k$

**end if**

**end while**

---

Die asynchrone Implementierung des GSS-Verfahren in HOPSPACK unterstützt eine parallele Ausführung des Optimierungsverfahrens, da innerhalb einer Iteration nicht auf die Beendigung der Evaluierung aller Samples gewartet wird. Sobald ein besserer Punkt im Untersuchungsraum

gefunden wird, werden alle Samples, deren Evaluierung nicht beendet wurde, verworfen. Die Suche wird ausgehend von dem neuen besten Punkt durch Erzeugung neuer Samples fortgeführt. Kolda (2005) zeigt, dass die asynchrone Variante schneller in der Ermittlung eines Optimums als die synchrone Variante ist.

### 4.3.2 Architektur von HOPSPACK

In Abbildung 4.5 sind die Hauptkomponenten von HOPSPACK dargestellt. In einem zentralen Hauptprozess werden Citizen, Mediator und Conveyor ausgeführt. Als Citizen werden die zur Verfügung stehenden Optimierungsverfahren zur Lösung des Optimierungsproblems bezeichnet. Zur Lösung eines Problems können mehrere Verfahren eingesetzt werden, die jedoch unabhängig voneinander agieren. Standardmäßig ist in HOPSPACK ein GSS-Algorithmus (siehe Abschnitt 4.3.1) implementiert, der zur Parameteroptimierung in dieser Arbeit genutzt wurde.

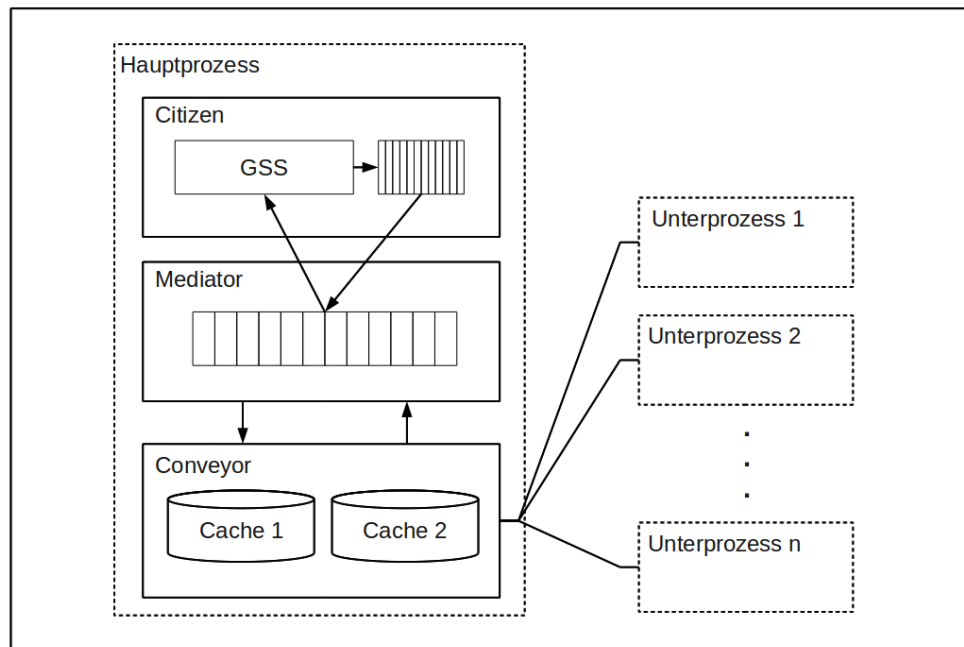


Abbildung 4.5: Architektur von HOPSPACK (Plantenga 2009).

Im Mediator wird die Hauptschleife zur Lösung des Optimierungsproblem ausgeführt. In jeder Iteration sammelt der Mediator die von den Citizens generierten Samples, die nach Zwischenspeicherung in einer internen Warteschlange (Queue) an den Conveyor weitergeleitet werden. Dieser prüft zunächst durch Abfrage der internen Caches, ob für das Sample bereits eine Evaluierung durchgeführt wurde (Cache 1) bzw. gerade durchgeführt wird (Cache 2). Ist dies nicht der Fall, so startet der Conveyor neue, eigenständige Unterprozesse zur Evaluierung der Samples. Nach Beendigung der Evaluierung durch die Unterprozesse, werden die Ergebnisse vom Conveyor an den Mediator weitergeleitet. Ist für eines der Samples ein Abbruchkriterium erfüllt, so wird die Optimierung beendet. Andernfalls wird eine neue Iteration gestartet, bei der neue Samples von den Citizens erfasst und zur weiteren Evaluierung an den Conveyor weitergeleitet werden.

### 4.3.3 Kopplung von MONICA und HOPSPACK

In Abbildung 4.6 ist am Beispiel des MONICA-Modells der Ablauf einer Optimierung unter Verwendung von HOPSPACK dargestellt. Die Kommunikation zwischen MONICA und HOPSPACK findet mittels Dateien unter Zuhilfenahme eines separaten Hilfsprogrammes statt. Die Ausführung von HOPSPACK wird mit Hilfe einer Konfigurationsdatei gesteuert, in der die Rahmenbedingungen der Optimierung festgelegt werden. Neben den Beschreibungen der Randbedingungen der Optimierung, werden in der Konfigurationsdatei die Namen der Dateien, die zum Datenaustausch erzeugt werden, der Name des auszuführenden Hilfsprogramms, die Anzahl der zu verwendeten Prozessoren sowie Anzahl und Wertebereich der zu optimierenden Parameter, etc., festgelegt. Eine ausführliche Beschreibung der möglichen Einstellungen der Konfigurationsdatei von HOPSPACK ist im Benutzerhandbuch der Software zu finden (Plantenga 2012).

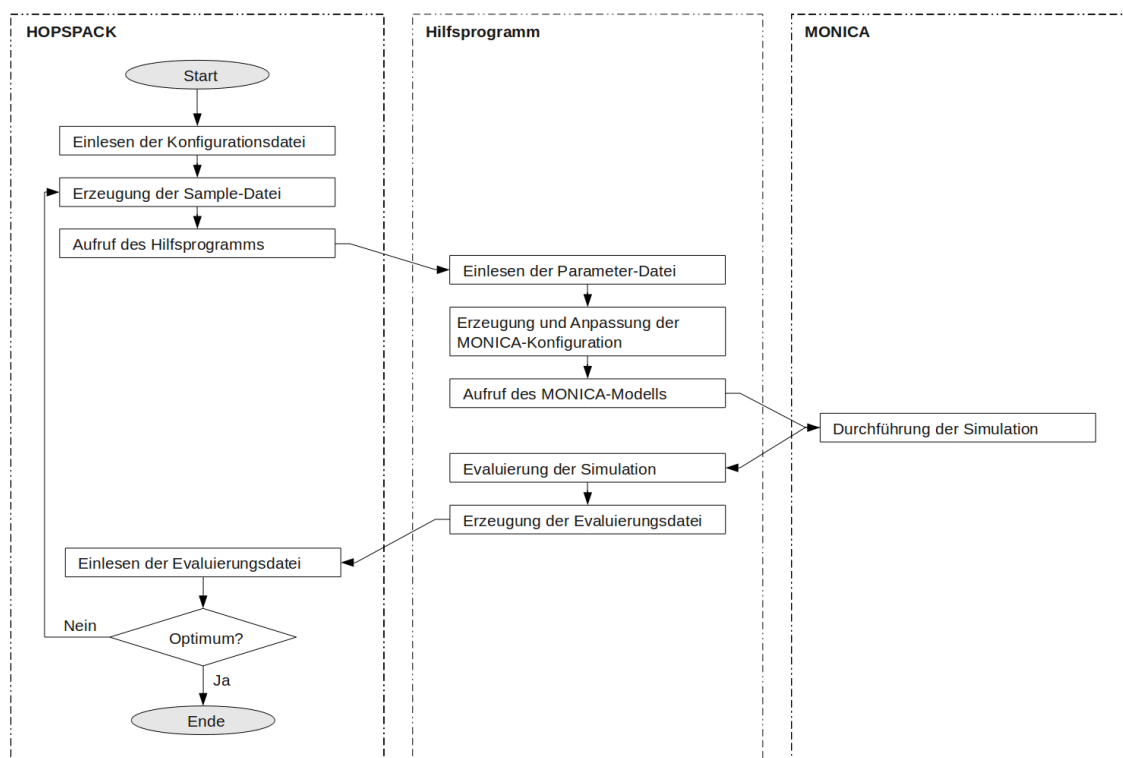


Abbildung 4.6: Ablauf der Kommunikation zwischen HOPSPACK und MONICA.

Beim Aufruf von HOPSPACK wird der Name der Konfigurationsdatei als Kommandozeilenparameter übergeben. Basierend auf den Informationen der Konfigurationsdatei startet HOPSPACK den Optimierungsprozess. Unter Berücksichtigung des Wertebereichs der zu optimierenden Parameter werden die zu untersuchenden Parameter-Samples in eine separate Datei geschrieben. Anschließend wird das Hilfsprogramm von HOPSPACK aus gestartet. Dieses liest das neue Sample der Parameter-Datei ein, erzeugt die notwendige Konfiguration zur Ausführung von MONICA und startet anschließend das Simulationsmodell. Nach Abschluss der Modellsimulation, wobei die von HOPSPACK erzeugten Parameterwerte für die Simulation verwendet wurden, wertet das Hilfsprogramm die Ergebnisse der Simulation aus. Basierend auf den Simulationsergebnissen wird als Fehlermaß der Normalised Mean Absolute Error (nMAE) (Kapitel 4.4) berechnet, welcher die normierte, absolute Abweichung zwischen den Modell- und Messwerten beschreibt. Das Fehlermaß

stellt das zu minimierende Optimierungskriterium für die Parameteroptimierung von MONICA dar. Nach dem Schreiben des Fehlermaßes in eine separate Datei ist die Ausführung des Hilfsprogramms beendet. In HOPSPACK wird anschließend das Ergebnis der Evaluierung geprüft und weiterverarbeitet. Ist das Abbruchkriterium zur Beendigung der Optimierung nicht erfüllt, startet HOPSPACK eine neue Iteration.

#### 4.4 Statistische Gütemaße zur Validierung von MONICA

Die Validierung dient dem Nachweis der Vorhersagequalität eines Modells. In der Modellierung hängt der Prozess der Validierung eng mit der Kalibrierung zusammen. Während bei der Kalibrierung verschiedene Modellparameter angepasst werden, um eine möglichst hohe Übereinstimmung des Modells mit den Messwerten zu erreichen, wird bei der Validierung die Vorhersagequalität des Modells an unabhängigen Datensätzen, d.h. an Datensätzen, die nicht bei der Kalibrierung verwendet wurden, überprüft. Die Validierung ermöglicht vor diesem Hintergrund eine Identifizierung von Modellproblemen und Optionen zur Modellverbesserung. In dieser Arbeit erfolgt die Validierung durch den Vergleich von Mess- und Simulationswerten.

Verschiedene statistische Gütemaße zum Vergleich der Übereinstimmung von Mess- und Modellwerten werden dabei zur Modellkalibrierung und -validierung eingesetzt (Wallach et al. 2006; Janssen and Heuberger 1995). Sie vergleichen beobachtete und simulierte Werte und ermöglichen eine Analyse des Modellverhaltens durch Identifikation von Modellunter- bzw. -überschätzungen. Dabei wird zwischen absoluten und relativen Gütemaßen unterschieden. Relative Gütemaße sind dimensionslos und eignen sich zum Vergleich verschiedener Modellparameter. Legates and McCabe Jr. (1999) und Janssen and Heuberger (1995) empfehlen die Verwendung verschiedener, relativer als auch absoluter Gütemaße zur Bewertung der Modellqualität.

In dieser Arbeit wurden die folgenden Kenngrößen für die Bewertung der Modellperformanz verwendet:

$$MAE = \sum_{i=1}^n \frac{|P_i - O_i|}{n} \quad (4.18)$$

$$nMAE = \frac{MAE}{\bar{O}} \quad (4.19)$$

$$MBE = \sum_{i=1}^n \frac{(P_i - O_i)}{n} \quad (4.20)$$

$$nMBE = \frac{\sum_{i=1}^n (P_i - O_i)}{\sum_{i=1}^n O_i} \quad (4.21)$$

$$EF = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (P_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2} \quad (4.22)$$

mit  $n$  als Anzahl der zur Verfügung stehenden Messwerte,  $P_i$  als  $i$ ten Modellwert,  $O_i$  als  $i$ ten Messwert und  $\bar{O}$  als Mittelwert der Messwerte.

Der MAE (Mean Absolute Error, Shaeffer, 1980) berechnet die mittleren, absoluten Abweichungen und stellt eine Alternative zum häufig eingesetzten RMSE (Root Mean Square Error) dar.



Aufgrund seiner quadratischen Natur reagiert der RMSE empfindlicher als der MAE auf Ausreißer. Da der MAE nur absolute, unveränderte Abweichungen berücksichtigt, ist der MAE robuster als der RMSE (Willmott and Matsuura 2005). Je kleiner der MAE, desto größer die Übereinstimmung von Mess- und Modellwerten. Durch Teilung des MAE durch den Mittelwert der Messwerte wird dieser normiert (nMAE).

Der MBE (Mean Bias Error, Addiscott and Whitmore, 1987) wird zur Berechnung der Abweichungen zwischen Mess- und Modellwerten verwendet. Im Vergleich zum MAE werden die vorzeichenbehafteten Differenzen akkumuliert. Aus diesem Grund besteht beim MBE die Gefahr, dass sich negative und positive Abweichungen gegenseitig aufheben. Ein positiver MBE deutet auf eine Überschätzung, ein negativer MBE auf eine Unterschätzung des Modells hin. Der optimale Wert des MBE ist Null, wobei jedoch die mögliche Aufhebung positiver und negativer Abweichungen zu berücksichtigen ist. Trotz dieser Schwäche stellt der MBE ein wichtiges Fehlermaß bei der Validierung eines Modells dar. Er wird verwendet, um einen Bias des Modells zu identifizieren. Jedoch sollte er zur Gewährleistung einer korrekten Interpretation im Zusammenhang mit einem absoluten Fehlermaß wie dem MAE betrachtet werden. Der Normalised Mean Bias Error (nMBE) stellt die normierte Variante des MBE dar.

Während MAE, nMAE, MBE und nMBE auf der Berechnung von Differenzen zwischen Mess- und Modellwerten basieren, wird bei der Modelling Efficiency (EF) die Korrelation berücksichtigt. Nach Nash and Sutcliffe (1970) beschreibt die EF den Anteil der Varianz der gemessenen Werte, die durch das Modell erklärt werden kann. Der Wertebereich der EF variiert zwischen  $-\infty$  und 1, wobei  $EF = 1$  das zu erzielende Optimum ist. Ist die EF größer Null ( $EF > 0$ ), so stellt das Modell eine bessere Schätzung als der Mittelwert der Messwerte bereit. Ein Modell besitzt geringe Abweichungen mit den Messwerten und eine gute Korrelation, wenn die EF zwischen 0 und 1 liegt ( $0 < EF \leq 1$ ).

## 4.5 Die Rechen- und Simulationsumgebung

Sowohl die Sensitivitätsanalysen als auch die Parameteroptimierung und die Modellsimulationen zur Validierung von MONICA wurden auf einem Hochleistungsrechencluster des ZALF durchgeführt. Das ZALF Rechner-Cluster besteht aus zwei identischen Maschinen, wobei jede Maschine 48 Prozessorkerne besitzt und über 192 GB RAM verfügt (Abb. 4.7). Jeder Rechner besitzt eine Anbindung an eine 1 TB große Festplatte, die über Samba (<http://www.samba.org>) bereitgestellt wird. Auf dem HPC ist das Betriebssystem Debian GNU/Linux 6.0 (<http://www.debian.org>) installiert. Beide Rechner können einzeln bzw. auch zusammen betrieben werden, um die Rechenleistung zu erhöhen. Durch Dopplung der Systeme wird eine Redundanz erreicht, so dass auch bei Ausfall eines Rechners weiter am Cluster gearbeitet werden kann.

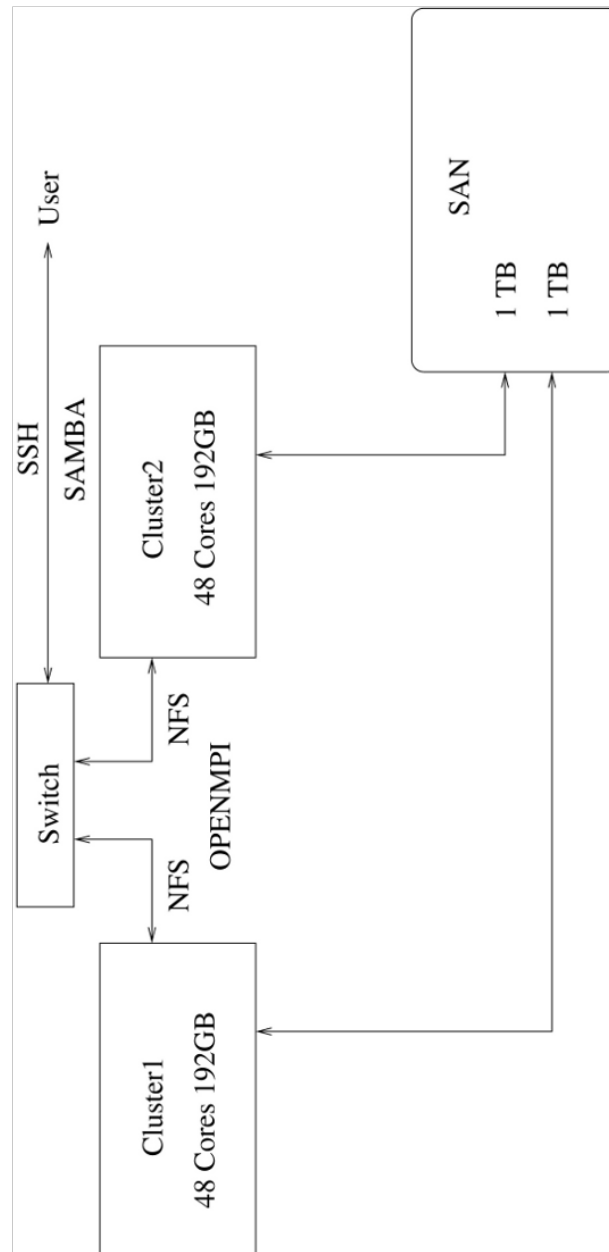


Abbildung 4.7: Schematische Darstellung des HPC-Systems des ZALF (Wieland et al. 2012)

## 5 Sensitivitätsanalysen von MONICA

Bei der Durchführung der Sensitivitätsanalyse (SA) des MONICA-Modells wurden verschiedene Zielvorstellungen verfolgt. Zum Einen wurde die SA zur Identifikation relevanter Modellparameter und Unterstützung des Parametrisierungsprozesses von MONICA eingesetzt. Zum Anderen diente die SA der Analyse und Validierung des Modellverhaltens mit dem Ziel der Verbesserung des Modellverständnisses.

In diesem Kapitel werden die Zielvorstellungen und Ergebnisse der am MONICA-Modell realisierten SA präsentiert. Zunächst wird der in den SA verwendete Untersuchungsrahmen vorgestellt. Anschließend erfolgt eine Beschreibung der Ergebnisse der durchgeführten Analysen. Zur Untersuchung von MONICA wurden drei verschiedene SA mit jeweils unterschiedlichem Fokus umgesetzt. Als erstes wurde die Parametersensitivität verschiedener Fruchtarten bestimmt und miteinander verglichen. Anschließend erfolgte die Quantifizierung der Parametersensitivität für verschiedene Modelloutputs am Beispiel von Winterweizen. In einer abschließenden Analyse basierend auf der output-orientierten SA für Winterweizen wurde die zeitabhängige Veränderung der Sensitivität ausgewählter Parameter untersucht.

### 5.1 Selektion der Modellparameter und Definition des Wertebereichs

Ein zentraler Schritt bei der Durchführung einer SA umfasst die Parameterauswahl und Definition des Parameter-Untersuchungsraums. In Abhängigkeit von den Anforderungen der angewandten Methode wird der Wertebereich bzw. die Verteilungsfunktion der Parameter festgelegt. Die Spezifikation des Untersuchungsraums ist aufgrund des großen Einflusses auf das Ergebnis der SA sehr sorgfältig durchzuführen (Saltelli et al. 2000; Wallach et al. 2006). Es ist zu berücksichtigen, dass, je mehr Parameter in den Untersuchungen integriert werden bzw. je größer der Wertebereich der Parameter gewählt wird, die erforderliche Anzahl an Parameter-Samples zur Gewährleistung einer ausreichenden Abdeckung des Untersuchungsraum steigt.

Ein wesentliches Ziel der SA am MONICA-Modell war die Identifizierung relevanter Modellparameter, für die eine Anpassung während der Kalibrierung des Modells für neue Energiepflanzen erforderlich ist. Aufgrund der hohen Parameteranzahl von MONICA war es nicht möglich, sämtliche Modellparameter in den SA zu betrachten. Daraufhin erfolgte eine Vorauswahl der zu untersuchenden Parameter, wobei – vor dem Hintergrund der Modellkalibrierung – primär pflanzenspezifische Parameter in die Untersuchungen integriert wurden.

Die Entwicklung der Pflanze (Ontogenese) wird im Modell in verschiedene Entwicklungsstadien unterteilt (siehe Kapitel 3.1). Infolgedessen weisen zahlreiche Parameter in Abhängigkeit vom aktuellen Entwicklungsstadium unterschiedliche Werte auf. In den Untersuchungen von MONICA wurden diese Parameter einzeln, für jedes Entwicklungsstadium individuell, untersucht. Insgesamt wurden 108 Modellparameter im Rahmen der SA ausgewählt. Eine vollständige Auflistung und Beschreibung der untersuchten Parameter befindet sich in Tabelle 5.1. Aufgelistete Parameter ohne

Einheit sind einheitenlos. In den SA wurden nur unkorrelierte Parameter integriert.

Sowohl für die Anwendung der Morris- als auch der Extended FAST-Methode ist eine Spezifikation des zu untersuchenden Wertebereichs erforderlich. Informationen zum Wertebereich der Parameter wurden entweder aus der Fachliteratur entnommen, bzw. – falls diese Informationen nicht zur Verfügung standen – mit Hilfe von Expertenwissen abgeschätzt. Der Wertebereich der untersuchten Parameter befindet sich in den Tabellen A.1 - A.3 im Anhang.

Tabelle 5.1: Beschreibung der Parameter, die in den Sensitivitätsanalysen untersucht wurden.

No.	Parameter	Beschreibung	Einheit	Stadium
1	maxAssimRate	Maximale Assimilationsrate je Blattfläche	[kg CO <sub>2</sub> ha <sup>-1</sup> ]	
2	maxCropDiameter	Maximaler Pflanzendurchmesser	[m]	
3	plantDensity	Pflanzendichte	[m <sup>-2</sup> ]	
4	rootPenRate	Vertikale Wurzelwachstumsrate	[m °C <sup>-1</sup> d <sup>-1</sup> ]	
5	rootGrowthLag	Für das Wurzelwachstum erforderliche Temperatursumme	[°C]	
6	initRootingDepth	Initiale Wurzeltiefe der Pflanze	[m]	
7	specMaxRootDepth	Pflanzenspezifische maximale Durchwurzelungstiefe	[m]	
8	rootFormFactor	Faktor zur Beschreibung der Struktur der Wurzelmas- senverteilung in der Bodentiefe		
9	minNConcRoot	Minimaler Wert der Wurzel-N-Konzentration	[kg N kg <sup>-1</sup> ]	
10	NConcRoot	Initialwert der Wurzel-N-Konzentration	[kg N kg <sup>-1</sup> ]	
11	maxNUptakeParam	Maximale N-Aufnahme je Wurzellänge	[kg m Root <sup>-1</sup> ]	
12	minAvailableN	Mineralische N-Konzentration im Boden, die nicht für die Pflanzenaufnahme zur Verfügung steht	[kg m <sup>-3</sup> ]	
13	defaultRadUseEff	Standard-Strahlungsnutzungseffizienz	[kg / ha h / J m <sup>2</sup> s]	
14	canopyRefCoef	Reflektionskoeffizient der Pflanzenbedeckung		
15	saturationBeta	Faktor zur Berechnung des Stomata-Widerstands		
16	stomataCondAlpha	Stomata Leitfähigkeitswert		
17	stageAtMaxHeight	Entwicklungsstadium, in der die maximale Pflanzenhö- he erreicht wird		
18	cropHeightP1	Faktor der Pflanzenhöhe		
19	cropHeightP2	Reduktionsfaktor der Pflanzenhöhe		
20	luxuryNCoeff	Koeffizient zur Beschreibung der maximalen N- Konzentration im Verhältnis zur kritischen N- Konzentration im Pflanzengewebe		
21	maintRespP1	Q <sub>10</sub> Faktor der Erhaltungsatmung		
22	maintRespP2	Temperaturabhängiger Skalierungsfaktor	[°C]	
23	growthRespP1	Q <sub>10</sub> Faktor der Wachstumsatmung		
24	growthRespP2	Temperaturabhängiger Skalierungsfaktor	[°C]	
25	residueNRatio	N-Konzentration der Ernterückstände relativ zur N- Konzentration im marktreifen Ertrag		
26	minimumNConc	Minimale N-Konzentration im Pflanzengewebe	[%]	
27	nConcB0	Krümmung der kritischen N-Konzentrationskurve		

No.	Parameter	Beschreibung	Einheit	Stadium
28	nConcPN	Formfaktor der kritischen N-Konzentrationskurve		
29	specAnaerobDenit	Denitrifikationsrate unter Standardbedingungen (25°C)	[g N g CO <sub>2</sub> -C <sup>-1</sup> ]	
30	immobRateCoeffNO3	Koeffizient der Immobilisationsrate für NO <sub>3</sub>	[d <sup>-1</sup> ]	
31	immobRateCoeffNH4	Koeffizient der Immobilisationsrate für NH <sub>4</sub>	[d <sup>-1</sup> ]	
32	maxCropNDemand	Maximale Menge an mineralischem N, der durch die Pflanze aufgenommen wird	[kg m <sup>-2</sup> ]	
33	nitrRateCoeffStand	Standardkoeffizient der Nitrifikationsrate	[d <sup>-1</sup> ]	
34	transportRateCoeff	Diffusion von Nitraten zu Denitrifikationszonen	[kg N m <sup>-3</sup> d <sup>-1</sup> ]	
35	CNRatioSMB	C-N-Verhältnis der bodenmikrobiellen Biomasse		
36	AOMDryMatterCont	Trockenmassegehalt der Zufuhr organischer Substanz	[%]	
37	AOMNH4Content	Ammoniumgehalt der Zufuhr organischer Substanz	[%]	
38	AOMNO3Content	Nitratgehalt der Zufuhr organischer Substanz	[%]	
39	AOMCarbamidCont	Carbamidgehalt der Zufuhr organischer Substanz	[%]	
40	partAOM2AOMSlow	Teil der zugeführten organischen Substanz des langsam zersetzenden AOM Pools		
41	partAOM2AOMFast	Teil der zugeführten organischen Substanz des schnell zersetzenden AOM Pools		
42	CNRationAOMSlow	C-N-Verhältnis der langsam abbauenden zugeführten organischen Substanz		
43	CNRationAOMFast	C-N-Verhältnis der schnell abbauenden zugeführten organischen Substanz		
44	SOMSlowDecCoeffStand	Abbaurrate des Pools der langsam abbauenden organischen Bodensubstanz	[d <sup>-1</sup> ]	
45	SOMFastDecCoeffStand	Abbaurrate des Pools der schnell abbauenden organischen Substanz	[d <sup>-1</sup> ]	
46	SMBSlowMaintRateStand	Erhaltungsrate der langsam reproduzierenden bodenmikrobiellen Biomasse	[d <sup>-1</sup> ]	
47	SMBFastMaintRateStand	Erhaltungsrate der schnell reproduzierenden bodenmikrobiellen Biomasse	[d <sup>-1</sup> ]	
48	SMBSlowDeathRateStand	Todesrate der langsam wachsenden Bodenmikroben unter Standardbedingungen (25[°C])		
49	SMBFastDeathRateStand	Todesrate der schnell wachsenden Bodenmikroben unter Standardbedingungen (25[°C])		
50	SMBUtilEff	Substrat-Nutzungseffizienz der Bodenmikroben		
51	SOMSlowUtilEff	Mikrobielle Nutzungseffizienz des Pools der langsam abbauenden organischen Bodensubstanz		
52	SOMFastUtilEff	Mikrobielle Nutzungseffizienz des Pools der schnell abbauenden organischen Bodensubstanz		
53	AOMSlowUtilEff	Nutzungseffizienz der langsam abbauenden zugeführten organischen Substanz		
54	AOMFastUtilEff	Nutzungseffizienz der schnell abbauenden zugeführten organischen Substanz		
55	AOMFastMaxC2N	Maximales C-N-Verhältnis der schnell abbauenden zugeführten organischen Substanz		

No.	Parameter	Beschreibung	Einheit	Stadium
56	HydrolysisKM	Parameter zur Beschreibung der Harnstoffhydrolyse		
57	HydrolysisP1	Parameter zur Beschreibung der Harnstoffhydrolyse		
58	HydrolysisP2	Parameter zur Beschreibung der Harnstoffhydrolyse		
59	DiffusionCoefStand	Diffusionskoeffizient des Bodens unter Standardbedingungen	[m <sup>2</sup> d <sup>-1</sup> ]	
60 <sub>1</sub>	stageTempSum <sub>1</sub>	Temperatursumme der individuellen Entwicklungsstadien	[°C]	1
60 <sub>2</sub>	stageTempSum <sub>2</sub>		[°C]	2
60 <sub>3</sub>	stageTempSum <sub>3</sub>		[°C]	3
60 <sub>4</sub>	stageTempSum <sub>4</sub>		[°C]	4
60 <sub>5</sub>	stageTempSum <sub>5</sub>		[°C]	5
60 <sub>6</sub>	stageTempSum <sub>6</sub>		[°C]	6
60 <sub>7</sub>	stageTempSum <sub>7</sub>		[°C]	7
61 <sub>1</sub>	stageKcFactor <sub>1</sub>	Entwicklungsstadienabhängiger $K_c$ Faktor		1
61 <sub>2</sub>	stageKcFactor <sub>2</sub>			2
61 <sub>3</sub>	stageKcFactor <sub>3</sub>			3
61 <sub>4</sub>	stageKcFactor <sub>4</sub>			4
61 <sub>5</sub>	stageKcFactor <sub>5</sub>			5
61 <sub>6</sub>	stageKcFactor <sub>6</sub>			6
61 <sub>7</sub>	stageKcFactor <sub>7</sub>			7
62 <sub>1</sub>	droughtStressTresh <sub>1</sub>	Schwellwert zur Wachstumsbeschleunigung bei Wasserstress		1
62 <sub>2</sub>	droughtStressTresh <sub>2</sub>			2
62 <sub>3</sub>	droughtStressTresh <sub>3</sub>			3
62 <sub>4</sub>	droughtStressTresh <sub>4</sub>			4
62 <sub>5</sub>	droughtStressTresh <sub>5</sub>			5
62 <sub>6</sub>	droughtStressTresh <sub>6</sub>			6
62 <sub>7</sub>	droughtStressTresh <sub>7</sub>			7
63 <sub>1</sub>	vernReq <sub>1</sub>	Temperatursumme für eine optimale Vernalisation	[°C]	1
63 <sub>2</sub>	vernReq <sub>2</sub>		[°C]	2
63 <sub>3</sub>	vernReq <sub>3</sub>		[°C]	3
64 <sub>1</sub>	daylengthReq <sub>1</sub>	Erforderliche Tageslänge für ein maximales Pflanzenwachstum	[h]	1
64 <sub>2</sub>	daylengthReq <sub>2</sub>		[h]	2
64 <sub>3</sub>	daylengthReq <sub>3</sub>		[h]	3
64 <sub>4</sub>	daylengthReq <sub>4</sub>		[h]	4
64 <sub>5</sub>	daylengthReq <sub>5</sub>		[h]	5
64 <sub>6</sub>	daylengthReq <sub>6</sub>		[h]	6
64 <sub>7</sub>	daylengthReq <sub>7</sub>		[h]	7
65 <sub>1</sub>	specificLeafArea <sub>1</sub>	Spezifische Blattfläche zur Berechnung des Blattflächenindex (LAI)	[ha kg <sup>-1</sup> ]	1
65 <sub>2</sub>	specificLeafArea <sub>2</sub>		[ha kg <sup>-1</sup> ]	2
65 <sub>3</sub>	specificLeafArea <sub>3</sub>		[ha kg <sup>-1</sup> ]	3
65 <sub>4</sub>	specificLeafArea <sub>4</sub>		[ha kg <sup>-1</sup> ]	4
65 <sub>5</sub>	specificLeafArea <sub>5</sub>		[ha kg <sup>-1</sup> ]	5

No.	Parameter	Beschreibung	Einheit	Stadium
65 <sub>6</sub>	specificLeafArea <sub>6</sub>		[ha kg <sup>-1</sup> ]	6
65 <sub>7</sub>	specificLeafArea <sub>7</sub>		[ha kg <sup>-1</sup> ]	7
66 <sub>1</sub>	stageMaxRootN <sub>1</sub>	Maximaler N-Gehalt in der Wurzel	[%]	1
66 <sub>2</sub>	stageMaxRootN <sub>2</sub>		[%]	2
66 <sub>3</sub>	stageMaxRootN <sub>3</sub>		[%]	3
66 <sub>4</sub>	stageMaxRootN <sub>4</sub>		[%]	4
66 <sub>5</sub>	stageMaxRootN <sub>5</sub>		[%]	5
66 <sub>6</sub>	stageMaxRootN <sub>6</sub>		[%]	6
66 <sub>7</sub>	stageMaxRootN <sub>7</sub>		[%]	7
67 <sub>1</sub>	critOxygenContent <sub>1</sub>	Krit. Sauerstoffgehalt für das Pflanzenwachstum	[Vol-%]	1
67 <sub>2</sub>	critOxygenContent <sub>2</sub>		[Vol-%]	2
67 <sub>3</sub>	critOxygenContent <sub>3</sub>		[Vol-%]	3
67 <sub>4</sub>	critOxygenContent <sub>4</sub>		[Vol-%]	4
67 <sub>5</sub>	critOxygenContent <sub>5</sub>		[Vol-%]	5
67 <sub>6</sub>	critOxygenContent <sub>6</sub>		[Vol-%]	6
67 <sub>7</sub>	critOxygenContent <sub>7</sub>		[Vol-%]	7

## 5.2 Sensitivitätsanalyse für verschiedene Fruchtarten

Der Fokus dieser SA lag in der Analyse der Parametersensitivität von MONICA in Abhängigkeit der untersuchten Fruchtart. Dabei wurde die Fragestellung untersucht, inwieweit sich die sensiblen Parameter und die Reihenfolge dieser Parameter für unterschiedliche Fruchtarten voneinander unterscheiden. In Hinblick auf die spätere Modellkalibrierung wurde überprüft, ob für verschiedene Fruchtarten die Anpassung unterschiedlicher Modellparameter erforderlich ist. Weiterhin erfolgte ein Vergleich der Parameter-Sensitivitäten, um festzustellen, ob für physiologisch ähnliche Fruchtarten die gleichen Modellparameter sensitiv sind. Für jede untersuchte Fruchtart wurde der individuelle Wertebereich der Parameter spezifiziert (Tabellen A.1 - A.3 im Anhang). In den Analysen wurden folgende Fruchtarten integriert:

- Winterweizen (WW)
- Wintertriticale (WTR)
- Wintergerste (WG)
- Winterraps (WRA)
- Sommergerste (SG)
- Sommertriticale (STR)
- Zuckerrübe (ZR)
- Mais (MAI)
- Sudangras (SUD)
- Phacelia (PHA)
- Klee gras (KLG)
- Luzerne gras (LZG)
- Weidel gras (WDG)
- Hafer (HAF).

Die Analyse der Sensitivität erfolgte am Modelloutput *oberirdische Biomasse* (AGB) zum Erntezeitpunkt. Dieser Output wurde ausgewählt, da sowohl Pflanzen- als auch Bodenprozesse Einfluss auf diesen haben.

### 5.2.1 Simulationsszenario

Für die Durchführung der SA standen die Versuchsdaten der EVA-Projekte zur Verfügung. Bei der Auswahl des optimalen Versuchsstandortes zur Realisierung der SA spielten die Bodenqualität und die mittleren, jährlichen Niederschläge eine entscheidende Rolle. Ziel war es, einen Standort auszuwählen, an dem eine optimale Wasserversorgung beim Pflanzenanbau gewährleistet werden kann. Eine nicht-optimale Wasserversorgung würde zu Wasserstress der Pflanzen führen, was ein reduziertes Wachstum zur Folge hätte. Um keine verfälschten Aussagen bezüglich des Einflusses der Modellparameter auf das Pflanzenwachstum zu erhalten, wurde ein Versuchsstandort, bei dem Wasserstress nur selten auftritt, bestimmt. Der Standort Ascha, mit einem mittleren, jährlichen Niederschlag von 1024 wurde für die Durchführung der SA ausgewählt. Der Standort ist hauptsächlich durch lehmig sandige Böden geprägt und wird mit der Ackerzahl 47 charakterisiert. Die vorherrschenden Bodentypen sind Braunerden und Pseudogleye.

Als Simulationsrahmen der SA erfolgte die Festlegung des Zeitraums von 2005-2008. Die im Rahmen des EVA-Projektes erhobenen Wetterdaten von Ascha wurden für die Simulationen mit MONICA verwendet (Tabelle 5.2).

Tabelle 5.2: Zusammenfassung der verwendeten Wetterdaten aus Ascha für den Untersuchungszeitraum von 2005-2008.

Messgröße		2005	2006	2007	2008
Mittl. Niederschlag	[mm]	1041	1039	1164	970
Mittl. min. Temperatur	[°C]	3.41	4.01	4.59	4.54
Mittl. max. Temperatur	[°C]	12.73	13.73	14.34	13.71
Mittl. Temperatur	[°C]	7.98	8.6	9.28	8.92
Mittl. relative Luftfeuchte	[%]	83.7	85.5	86.7	81.8
Mittl. Windgeschwindigkeit	[m/s]	1.28	1.34	1.42	1.36
Akkum. Globalstrahlung	[MJ/m <sup>2</sup> ]	3925	4041	4041	3953

Für jede untersuchte Fruchtart wurde ein individuelles Anbauszenario erstellt (Tabelle 5.3). Dabei wurden die für eine MONICA-Simulation relevanten Arbeitsschritte wie Zeitpunkt der Bodenbearbeitung, Aussaat und Ernte sowie Details zum Düngemanagement spezifiziert. Die Managementdaten basieren auf Feldversuchsdaten des EVA-Projektes. Ein vierjähriger Untersuchungszeitraum von 2005 bis 2008 bildete die Basis der Berechnungen. Innerhalb des Untersuchungszeitraums erfolgte eine jährliche Wiederholung des Anbaus der analysierten Frucht. Sommerfrüchte mit Aussaat und Ernte im gleichem Jahr wurden insgesamt viermal (Erntejahre: 2005, 2006, 2007 und 2008), Winterungen mit Aussaat und Ernte in unterschiedlichen Jahren wurden dreimal (Erntejahre: 2006, 2007 und 2008) angebaut.

Die Berechnung der Sensitivitätsmaße erfolgte auf Basis der Mittlung der Above-Ground Biomass (AGB)-Werte der einzelnen Simulationsjahre, um so den klimatischen Einfluss auf die Sensitivität der Modellparameter zu reduzieren. Im Gegensatz zum untersuchten Getreide wird bei der Zuckerrübe der unterirdische Rübenkörper zur oberirdischen Biomasse dazu gezählt.



Tabelle 5.3: Spezifikation des individuellen Anbaumanagements der untersuchten Fruchtarten.

<b>Fruchtart</b>	<b>Boden- bearbeitung</b>	<b>Aussaat</b>	<b>Düngung</b>		<b>Ernte</b>
<b>Winterweizen</b>	13. Okt.	14. Oktober	31. März	88 kg N	29. Juli
			5. Mai	44 kg N	
			4. Juni	55 kg N	
			17. Juni	33 kg N	
<b>Wintertriticale</b>	11. Oktober	12. Oktober	14. März	60 kg N	16. Juli
			12. April	50 kg N	
			15. Mai	70 kg N	
<b>Wintergerste</b>	1. September	26. September	22. Oktober	30 kg N	5. Juni
			7. April	60 kg N	
			22. April	40 kg N	
<b>Winterraps</b>	21. August	23. August	18. September	50 kg N	29. Juni
			14. März	80 kg N	
			29. März	80 kg N	
<b>Sommergerste</b>	11. April	12. April	15. April	65 kg N	15. Juli
			6. Juni	44 kg N	
<b>Sommertriticale</b>	24. März	19. April	30. Mai	85 kg N	27. Juli
<b>Zuckerrübe</b>	22. März	23. März	29. März	70 kg N	12. Oktober
<b>Mais</b>	2. Mai	3. Mai	3. Mai	31 kg N	22. September
			22. Mai	80 kg N	
<b>Sudangras</b>	26. Mai	27. Mai	6. Juni	100 kg N	8. September
<b>Phacelia</b>	27. Juni	28. Juni	21. Juli	60 kg N	29. September
<b>Kleegras</b>	15. Juli	16. Juli	2. August	40 kg N	10. Oktober
<b>Luzernegras</b>	23. Juli	24. Juli	—	—	21. September
<b>Weidelgras</b>	16. Juli	17. Juli	26. Juli	100 kg N	19. Oktober
<b>Hafer</b>	11. April	12. April	15. April	60 kg N	20. Juli
			6. Juni	40 kg N	

### 5.2.2 Morris-Screening

Die Rastersuche nach Morris wurde zur Identifikation der relevantesten Modellparameter auf Basis eines effizienten Versuch-Designs eingesetzt. Die Diskretisierung des Parameterraums erfolgte

mit  $p = 20$  Stufen und der Schrittweite  $\Delta = \frac{5}{19}$  (siehe Kapitel 4.2.1). Aus einer Grundgesamtheit von  $M = 500$  zufälligen Startwerten wurden 40 Trajektorien ( $j = 40$ ) mit dem größt möglichen Abstand zueinander ausgewählt, um eine raumabdeckende Suche zu erreichen. Da maximal  $n = 108$  Parameter für eine Fruchtart untersucht wurden, betrug die maximale Anzahl der realisierten Modellsimulationen  $M_{max}$  für eine Fruchtart  $M_{max} = 4360$  mit  $M_{max} = j \cdot (n + 1) = 40 \cdot (108 + 1) = 4360$ . Die Anzahl der untersuchten Parameter variiert in Abhängigkeit von der Anzahl der Entwicklungsstadien einer Frucht. Winterweizen besitzt beispielsweise 6 Entwicklungsstadien, Mais jedoch 7. Daraus folgt, dass die Anzahl der untersuchten Modellparameter bei Mais höher ist (Vergleiche die Definition der Wertebereiche der Modellparameter in den Tabellen A.1 – A.3).

In Abbildung 5.1 sind exemplarisch für Winterweizen und Mais die auf Basis des Morris-Screening berechneten Sensitivitätsmaße  $\mu^*$  und  $\sigma$  dargestellt. Ein hoher Mittelwert ( $\mu^*$ ) weist auf die generelle Relevanz des Parameters hin. Eine hohe Standardabweichung impliziert entweder eine nicht-lineare Abhängigkeit von Modellparameter und -output oder aber Interaktionen mit anderen Modellparametern. In den Abbildungen sind die Parameter durch ihre jeweiligen Parameternummern (Tabelle 5.1) gekennzeichnet. Eine vollständige Darstellung des Morris-Screenings aller untersuchten Fruchtarten befindet sich in Abbildung A.1 im Anhang.

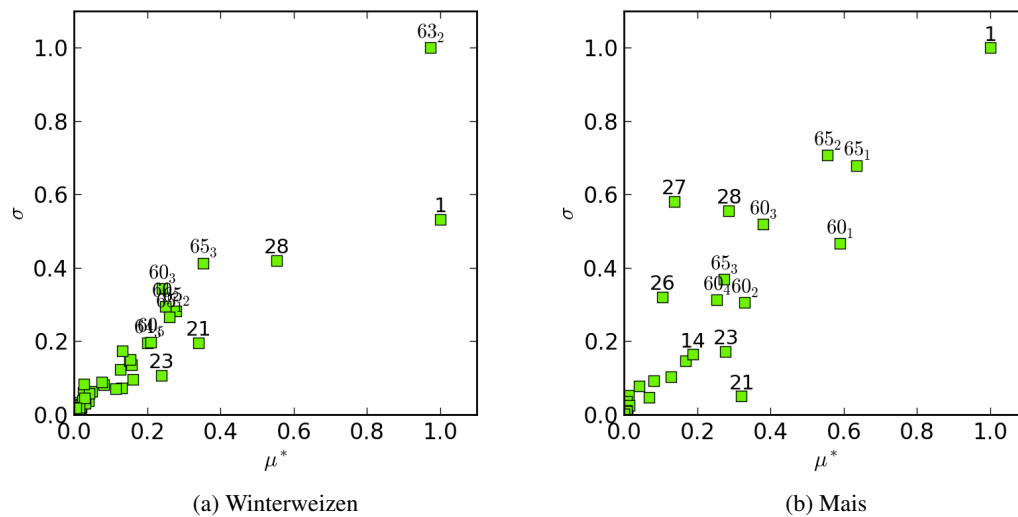


Abbildung 5.1: Teilergebnisse des Morris-Screening. Gegenüberstellung von  $\mu^*$  und  $\sigma$  exemplarisch für Winterweizen und Mais.

Das Parameter-Ranking der untersuchten Fruchtarten erfolgte auf Basis von  $\mu^*$  (Tabelle 5.4). Zur Vermeidung der Identifikation irrelevanter Parameter wurde ein Grenzwert mit  $\mu^* > 0.05$  festgelegt. Wenn der Wert von  $\mu^*$  eines Modellparameters diesen Grenzwert überschritten hat, wurde er in dem qualitativen Ranking berücksichtigt.

Das Parameter-Screening führte zur Identifikation einer kleinen Teilmenge an Modellparametern, die für den größten Teil der Output-Variabilität verantwortlich war. Nach Zusammenfassung aller Fruchtarten wurden von insgesamt 108 Parametern 32 als relevant identifiziert (Tabelle 5.4). Dabei variierte sowohl die Anzahl als auch die Reihenfolge der sensitiven Parameter für jede Fruchtart. Der Parameter zur Spezifikation der maximalen Assimilationsrate (*maxAssimRate*) wies eine besonders hohe Sensitivität unabhängig von der untersuchten Fruchtart auf. Weiter-

hin wurden die Parameter der Temperatursummen ( $stageTempSum_1$  -  $stageTempSum_3$ ) sowie die Parameter der Wachstums- und Erhaltungsaemung ( $maintRespP1$ ,  $maintRespP2$ ,  $growthRespP1$ ,  $growthRespP2$ ) als generell wichtig für alle Fruchtarten identifiziert.

Tabelle 5.4: Parameter-Ranking der Modellparameter des MONICA-Modells basierend auf den Ergebnissen der Morris-SA differenziert nach Fruchtarten.

No.	Parameter	WW	WTR	WG	WRA	SG	STR	ZR	MAI	SUD	PHA	KLG	LZG	WDG	HAF
1	maxAssimRate	1	2	1	2	1	1	1	1	3	1	1	1	1	2
6	initRootingDepth							12							
8	rootFormFactor			19			23								20
10	NConcRoot			20			14				19				
12	minAvailableN	14	8	3	12	3	3	14	19	6	3			11	3
14	canopyRefCoef	18	15	14	15	18	18	11	12	19	14	9		13	16
21	maintRespP1	5	4	5	5	10	11	8	7	13	8	3	5	4	10
22	maintRespP2	20	16	16	16	21	21	15	15	17	21	10	12	12	18
23	growthRespP1	10	6	11	7	12	13	10	9	16	11	6	8	7	12
24	growthRespP2	13	11	17	17	15	20	13	13	18	17	8	11	10	15
26	minimumNConc	21	13	10		13	4		16	8	6				9
27	nConcB0	15	19	7	18	17	17	17	14	14	5				17
28	nConcPN	3	3	2	10	2	2	7	8	2	2			5	1
56	HydrolysisKM							18							
60 <sub>1</sub>	stageTempSum <sub>1</sub>	17	1	6	19	5	15	9	3	5	15	5	4	9	7
60 <sub>2</sub>	stageTempSum <sub>2</sub>	8	9	15	8	7	5	2	6	1	4	2	6	8	4
60 <sub>3</sub>	stageTempSum <sub>3</sub>	9	14	9	3	6	8	5	5	4	9	7	9	14	6
60 <sub>4</sub>	stageTempSum <sub>4</sub>	16	12	24	4		22	16	11	7				15	14
60 <sub>5</sub>	stageTempSum <sub>5</sub>	11	7	23	13	11			18	10					
60 <sub>6</sub>	stageTempSum <sub>6</sub>		10							15					
61 <sub>1</sub>	stageKcFactor <sub>1</sub>		24	18	20	20		20		20	18				13
61 <sub>2</sub>	stageKcFactor <sub>2</sub>		20	22		16	7	21		12	7				8
61 <sub>3</sub>	stageKcFactor <sub>3</sub>						10	22			13				
61 <sub>4</sub>	stageKcFactor <sub>4</sub>		22				24								
63 <sub>2</sub>	vernReq <sub>2</sub>	2	25	25	1										
64 <sub>2</sub>	daylengthReq <sub>2</sub>	19	5	21	14	8	16				10	4	10		5
64 <sub>3</sub>	daylengthReq <sub>3</sub>	12	18	12	6	14	12				12	11			11
64 <sub>4</sub>	daylengthReq <sub>4</sub>	22			9										
65 <sub>1</sub>	specificLeafArea <sub>1</sub>	7	17	4	11	4	19	4	2	11		12	2	2	19
65 <sub>2</sub>	specificLeafArea <sub>2</sub>	6	23	8		9	9	3	4	9	16	13	3	3	
65 <sub>3</sub>	specificLeafArea <sub>3</sub>	4	21	13		19	6	6	10		20	14	7	6	
65 <sub>4</sub>	specificLeafArea <sub>4</sub>							19	17						
<b>Anzahl sensibler Parameter</b>		<b>22</b>	<b>25</b>	<b>25</b>	<b>20</b>	<b>21</b>	<b>24</b>	<b>22</b>	<b>19</b>	<b>20</b>	<b>21</b>	<b>14</b>	<b>12</b>	<b>15</b>	<b>20</b>

### 5.2.3 Haupt- und Totaleffekte

Der Rechenaufwand der Extended FAST-Methode ist im Vergleich zur Morris-Methode besonders hoch aufgrund der hohen Anzahl an Parameter-Samples, deren Evaluierung notwendig zur Berechnung der Sensitivitätsindizes ist. Zusätzlich sind bei der Extended Fast für jeden untersuchten Modellparameter individuelle Berechnungen zur Bestimmung der Sensitivitätsmaße erforderlich. Die Berechnung der *Haupt-* und *Totaleffekte* erfolgte ausschließlich für Parameter, die beim zuvor durchgeführten Morris-Screening als relevant eingestuft wurden (Tabelle 5.4). Die Berechnung der Haupt- und Totaleffekte erlaubt die Differenzierung zwischen dem direkten Einfluss eines Parameters auf einen Output (Haupteffekt) und den Interaktionseffekten, die durch Interaktionen mit anderen Parametern verursacht werden (Saltelli et al. 1999). Der Interaktionseffekt berechnet sich aus der Differenz von Total- und Haupteffekt.

Die Durchführung der Extended FAST erfordert die Definition unabhängiger Integer-Frequenzen. Die Berechnung der in dieser Arbeit verwendeten Frequenzen erfolgte auf Basis der von Saltelli et al. (2000) vorgeschlagenen Algorithmen. Die maximale Frequenz  $\omega_{max}$  des untersuchten Parameters wurde auf  $\omega_{max} = 4096$  festgelegt. Daraus folgte für die übrigen Parameter eine maximal zulässige Frequenz von 512. In Anlehnung an Saltelli et al. (2000) wurde als maximal zu berücksichtigende harmonische Frequenz  $M = 4$  gewählt. Die Berechnung des Haupt- und Totaleffektes eines Parameters erfolgte auf der Basis von insgesamt 20.000 erzeugten Parameter-Samples.

In Abbildung 5.2 sind die Ergebnisse der Extended FAST beispielhaft für Winterweizen und Mais dargestellt. Es erfolgte eine Differenzierung zwischen Haupt- und Interaktionseffekten. Die berechneten Totaleffekte aller Fruchtarten sind in Tabelle 5.5 aufgelistet. Eine vollständige Darstellung der Haupt- und Interaktionseffekte befindet sich in Abbildung A.2 im Anhang. Eine Beschreibung der untersuchten Modellparameter befindet sich in Tabelle 5.1. Die für jede Fruchtart individuell konfigurierten Wertebereiche sind in den Tabellen A.1 - A.1 im Anhang nachzulesen.

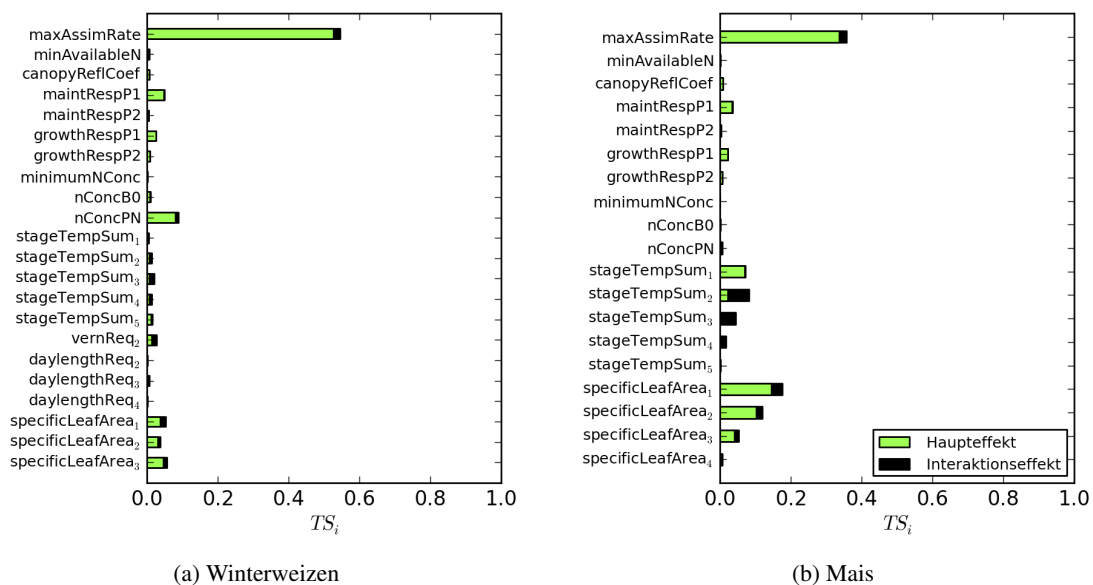


Abbildung 5.2: Darstellung der Haupt- und Totaleffekte der analysierten Modellparameter mittels der Extended FAST-Methode exemplarisch für Winterweizen und Mais.

Tabelle 5.5: Ergebnisse der Extended FAST. Totaleffekte der analysierten Parameter differenziert nach Fruchtarten.

No.	Parameter	WW	WTR	WG	WRA	SG	STR	ZR	MAI	SUD	PHA	KLK	LZG	WDG	HAF
1	maxAssimRate	0.55	0.33	0.59	0.3	0.5	0.43	0.29	0.36	0.15	0.43	0.45	0.95	0.97	0.46
6	initRootingDepth							0.01							
8	rootFormFactor														
10	NConcRoot														
12	minAvailableN	0.01	0.01	0.05	0.02	0.04	0.12	0.01		0.04	0.23				0.08
14	canopyReflCoef	0.01			0.01			0.01	0.01			0.01			
21	maintRespP1	0.05	0.03	0.02	0.04	0.02	0.01	0.03	0.04	0.01	0.01	0.1		0.01	0.02
22	maintRespP2	0.01			0.01							0.01			
23	growthRespP1	0.03	0.02	0.01	0.02	0.01	0.01	0.02	0.02	0.01	0.01	0.06			0.01
24	growthRespP2	0.01	0.01		0.01			0.01	0.01			0.01			
26	minimumNConc			0.01		0.01	0.05			0.01	0.02				0.02
27	nConcB0	0.01		0.02	0.01		0.01	0.01		0.01	0.03				
28	nConcPN	0.09	0.1	0.17	0.02	0.12	0.26	0.06	0.01	0.31	0.2				0.3
56	HydrolysisKM														
60 <sub>1</sub>	stageTempSum <sub>1</sub>	0.01	0.46	0.05	0.01	0.04		0.03	0.07	0.06		0.04	0.01		0.02
60 <sub>2</sub>	stageTempSum <sub>2</sub>	0.01	0.01		0.02	0.05	0.03	0.12	0.08	0.3	0.03	0.2			0.07
60 <sub>3</sub>	stageTempSum <sub>3</sub>	0.02	0.01	0.01	0.26	0.04	0.02	0.11	0.04	0.08	0.01	0.05			0.02
60 <sub>4</sub>	stageTempSum <sub>4</sub>	0.01	0.01		0.13				0.02	0.04					0.01
60 <sub>5</sub>	stageTempSum <sub>5</sub>	0.02	0.02		0.01	0.05				0.03					
60 <sub>6</sub>	stageTempSum <sub>6</sub>		0.01							0.02					
61 <sub>1</sub>	stageKcFactor <sub>1</sub>				0.01										
61 <sub>2</sub>	stageKcFactor <sub>2</sub>						0.01			0.01	0.02				0.01
61 <sub>3</sub>	stageKcFactor <sub>3</sub>						0.01				0.01				
61 <sub>4</sub>	stageKcFactor <sub>4</sub>														
63 <sub>2</sub>	vernReq <sub>2</sub>	0.03			0.22										
64 <sub>2</sub>	daylengthReq <sub>2</sub>		0.01		0.01	0.02	0.01				0.01	0.05			0.03
64 <sub>3</sub>	daylengthReq <sub>3</sub>	0.01		0.01	0.06	0.02	0.02				0.01	0.02			0.03
64 <sub>4</sub>	daylengthReq <sub>4</sub>				0.03										
65 <sub>1</sub>	specificLeafArea <sub>1</sub>	0.05	0.01	0.08	0.01	0.08	0.01	0.1	0.18	0.02		0.01	0.02	0.01	
65 <sub>2</sub>	specificLeafArea <sub>2</sub>	0.04		0.02		0.05	0.01	0.17	0.12	0.02		0.01	0.02	0.01	
65 <sub>3</sub>	specificLeafArea <sub>3</sub>	0.06				0.01	0.02	0.07	0.05		0.01	0.01		0.01	
65 <sub>4</sub>	specificLeafArea <sub>4</sub>								0.01						

#### 5.2.4 Vergleich der Parametersensitivität verschiedener Fruchtarten

Abschließend erfolgte ein Vergleich der Totaleffekte der analysierten Modellparameter. Der Vergleich zielte auf die Identifikation von Fruchtarten mit ähnlichen Parametersensitivitäten ab. Abbildung 5.3 enthält die Darstellung der berechneten Totaleffekte aller untersuchten Fruchtarten. Die Abbildung verdeutlicht den hohen Einfluss von *maxAssimRate* auf die AGB aller untersuch-

ten Fruchtarten. Zusätzlich waren die Parameter der Erhaltungs- und Wachstumsatmung (*growthRespP1*, *maintRespP1*) sowie *stageTempSum*<sub>1</sub>-*stageTempSum*<sub>3</sub> sensitiv für alle untersuchten Fruchtarten mit Ausnahme von Luzerne- und Weidelgras. Der Parameter *nConcPN* wies mit Ausnahme von Klee-, Luzerne- und Weidelgras einen sichtbaren Einfluss auf die AGB aller Fruchtarten aus. Generell zeigt sich, dass die Parameter zur Beschreibung der N-Aufnahme und des N-Stresses ohne Einfluss bei Leguminosen (Klee- und Luzernegras) und Weidelgras waren.

Der Vergleich der Parametersensitivität zeigte, dass für jede Fruchtart unterschiedliche Parameter sensitiv waren. Die Identifikation von Fruchtartengruppen aufgrund ähnlicher Parametersensitivitäten war nicht erfolgreich. Aus diesem Grund erfolgte eine Gruppierung der Fruchtarten mit ähnlichen, physiologischen Eigenschaften. Es wurde die Fragestellung untersucht, ob physiologisch ähnliche Fruchtarten vergleichbar sensitive Parameter besaßen. Tabelle 5.6 enthält die Angabe der vier gebildeten Fruchtartengruppen, für die eine Analyse der Parametersensitivitäten erfolgte.

Tabelle 5.6: Definition von Fruchtartengruppen mit physiologisch ähnlichen Charakteristika.

Wintergetreide	Sommergetreide	Ackerfuttermischung mit Leguminosenanteil	C <sub>4</sub> -Pflanzen
Winterweizen	Sommergerste	Kleegras	Mais
Wintertriticale	Sommertriticale	Luzernegras	Sudangras
Wintergerste	Hafer		

### Wintergetreide

Für die Fruchtarten der Gruppe *Wintergetreide* wurde ein signifikanter Einfluss für *maxAssimRate*, *maintRespP1*, *growthRespP1*, *nConcPN*, *stageTempSum*<sub>1</sub> und ein minimaler Einfluss für *minAvailableN* festgestellt. Weiterhin zeigten die Fruchtarten keine relevante Sensitivität für den K<sub>c</sub>-Faktor (*stageKcFactor*<sub>1</sub> - *stageKcFactor*<sub>4</sub>) und *HydrolysisKM*. Die Parameter *specificLeafArea*<sub>1</sub> und *specificLeafArea*<sub>2</sub> waren für Winterweizen und Wintergerste einflussreich, nicht aber für Wintertriticale.

### Sommergetreide

Die Sommergetreide-Fruchtarten waren sensitiv für *maxAssimRate*, *minAvailableN*, *nConcPN*, *stageTempSum*<sub>2</sub>, *stageTempSum*<sub>3</sub> und *daylengthReq*<sub>3</sub>. Keinen Einfluss besaßen die wurzelspezifischen Parameter *initRootingDepth*, *rootFormFactor* oder *NConcRoot*, sowie *vernReq*<sub>2</sub>. Für Sommergerste zeigten die Parameter *specificLeafArea*<sub>1</sub> und *specificLeafArea*<sub>2</sub> eine erhöhte Sensitivität. Allerdings waren sie nicht relevant für Sommertriticale und Hafer. Im Vergleich zu Sommergerste und Hafer war für Sommertriticale der Parameter *minimumNConc* leicht sensitiv.

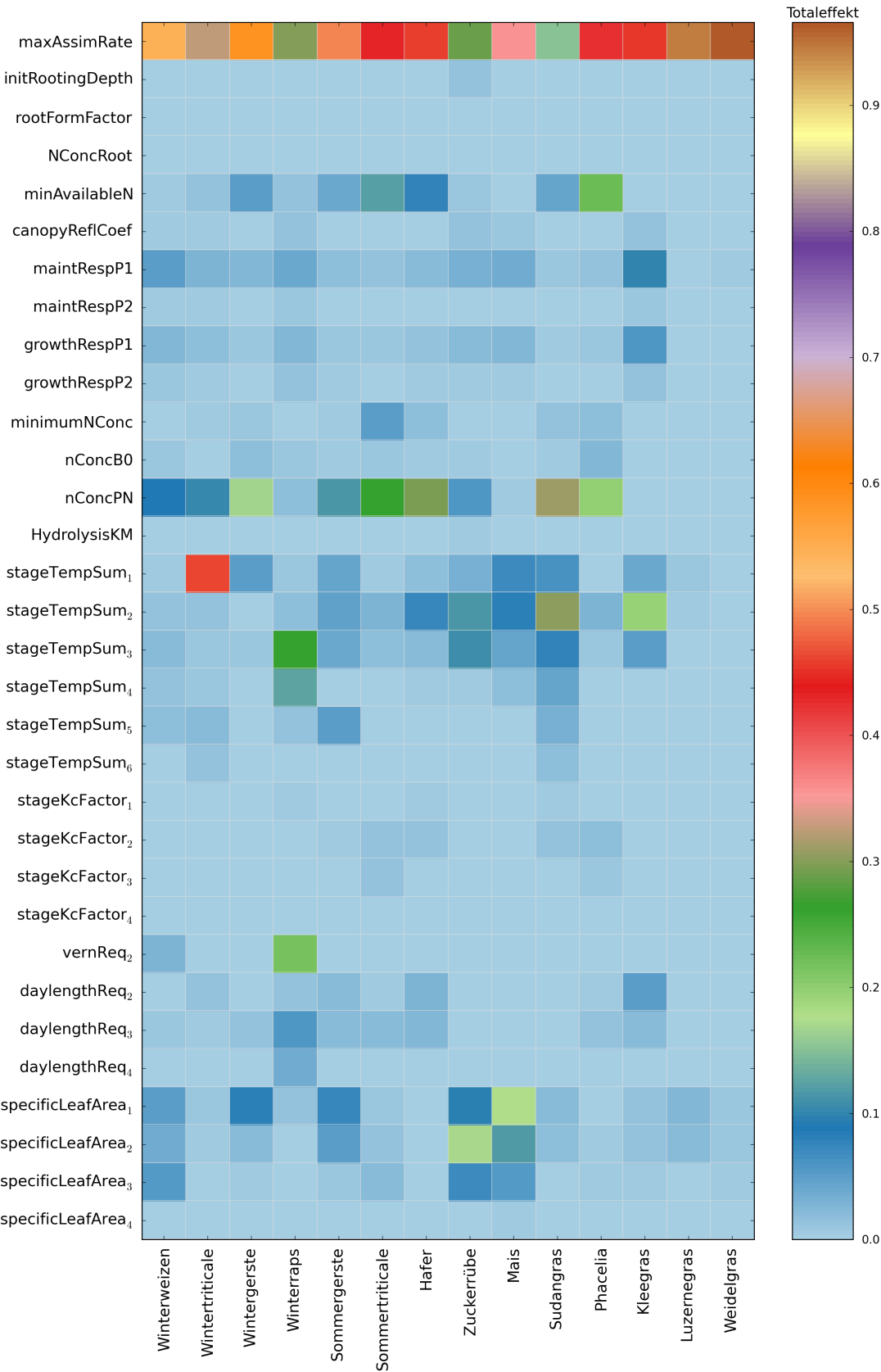


Abbildung 5.3: Gegenüberstellung der berechneten Totaleffekte der untersuchten Fruchtarten.

### Ackerfuttermischung mit Leguminosenanteil

Für Ackerfuttermischungen waren nur wenige Parameter sensitiv. Die AGB von Luzernegras wurde hauptsächlich durch *maxAssimRate* beeinflusst. Für Klee gras war *maxAssimRate* am sensitivsten, jedoch wurde das Wachstum der AGB von Klee gras geringfügig durch andere Parameter beeinflusst. Parameter zur Beschreibung der N-Aufnahme oder des N-Stresses waren nicht relevant für diese Fruchtarten. Weiterhin wurde keine Sensitivität für die wurzelspezifischen Parameter (*initRootingDepth*, *rootFormFactor*, *NConcRoot*) und  $K_c$ -Faktoren (*stageKcFactor*<sub>1</sub> - *stageKcFactor*<sub>4</sub>) festgestellt.

### C<sub>4</sub>-Pflanzen

Die C<sub>4</sub>-Pflanzen Mais und Sudangras wurden von *maxAssimRate*, *stageTempSum*<sub>1</sub>-*stageTempSum*<sub>3</sub> und *specificLeafArea*<sub>1</sub>-*specificLeafArea*<sub>4</sub> beeinflusst. Beide Fruchtarten wiesen keine Sensitivität für die Wurzelparameter (*initRootingDepth*, *rootFormFactor*, *NConcRoot*), *vernReq*<sub>2</sub>, *HydrolysisKM* und *daylengthReq*<sub>2</sub> - *daylengthReq*<sub>4</sub> auf. Für Sudangras waren außerdem die Temperatursummenparameter der späteren Entwicklungsstadien (*stageTempSum*<sub>5</sub> - *stageTempSum*<sub>6</sub>), *minAvailableN* und *nConcPN* sensitiv.

## 5.3 Sensitivitätsanalyse für verschiedene Outputs

In einer zweiten SA des MONICA-Modells wurde die Parametersensitivität in Abhängigkeit verschiedener Outputs untersucht. Das Ziel war es, die Sensitivität relevanter Parameter für unterschiedliche Modelloutputs zu quantifizieren. Weiterhin diente diese SA der Untersuchung des Modellverhaltens zur Verbesserung des Verständnisses des MONICA-Modells.

In den Analysen wurden – in Hinblick auf die spätere Modellkalibrierung – vorrangig Modelloutputs integriert, für die Messwerte aus dem EVA-Projekt zur Verfügung standen. Darüberhinaus erfolgte eine Untersuchung verschiedener pflanzen- und bodenspezifischer Outputs mit dem Ziel einer vertiefenden Analyse des Prozessverhaltens. Tabelle 5.7 enthält eine Auflistung und Erläuterung der betrachteten Modelloutputs.

Für jeden untersuchten Output erfolgte – äquivalent zur vorherigen SA – die Durchführung eines Parameter-Screenings mit dem Ziel der Identifizierung relevanter Modellparameter. Anschließend wurde die Sensitivität durch Berechnung der Haupt- und Totaleffekte mittels der Extended FAST quantifiziert.



Tabelle 5.7: Modelloutputs von MONICA, die in der SA untersucht wurden.

Output	Beschreibung	Einheit
AGB	Oberirdische Biomasse	[t ha <sup>-1</sup> ]
Yield <sup>*</sup>	Hauptertrag (Korn)	[t ha <sup>-1</sup> ]
Root	Wurzelbiomasse	[t ha <sup>-1</sup> ]
Shoot	Sprossbiomasse	[t ha <sup>-1</sup> ]
Leaf	Blattbiomasse	[t ha <sup>-1</sup> ]
LAI	Blattflächenindex	[m <sup>2</sup> m <sup>-2</sup> ]
GPP	Bruttoprimärprodukt der Pflanze	[kg C m <sup>-2</sup> ]
R <sub>a</sub>	Gesamtatmung der Pflanze	[kg C m <sup>-2</sup> ]
NConc <sup>*</sup>	N-Konzentration in der oberirdischen Trockenmasse	[kg N ha <sup>-1</sup> ]
Height <sup>*</sup>	Pflanzenhöhe zum Erntezeitpunkt	[m]
ET <sub>a</sub>	Aktuelle Evapotranspiration	[mm]
Moist <sup>*</sup>	Wassergehalt in 0-90 cm Tiefe	[Vol-%]
N <sub>min</sub> <sup>*</sup>	N <sub>min</sub> -Gehalt in 0-90 cm Tiefe	[kg N ha <sup>-1</sup> ]
Temp <sup>*</sup>	Bodentemperatur in 0-30 cm Tiefe	[°C]
C <sub>org</sub>	Kohlenstoffgehalt in 0-30 cm Boden	[kg C ha <sup>-1</sup> ]

<sup>\*</sup> Outputs, die im Fokus der späteren Modellkalibrierung standen, da der Vergleich mit Messwerten aus dem EVA-Projekt möglich war.

### 5.3.1 Simulationsszenario

Die SA für verschiedene Outputs wurde exemplarisch für die Fruchtart *Winterweizen* durchgeführt, da für diese bei der vorangegangenen SA eine hohe Anzahl sensibler Parameter identifiziert wurden (Abbildung 5.2a und Abbildung 5.3). Die Simulationen erfolgten auf Basis des für Winterweizen spezifizierten Simulationsszenarios, welches bereits in der SA für verschiedene Fruchtarten eingesetzt wurde (Tabelle 5.8, Kapitel 5.2.1). Die Management-Daten bezüglich Bodenbearbeitung, Aussaat, Düngung und Ernte basieren auf Feldversuchsdaten des EVA-Projektes. Der Untersuchungszeitraum wurde von 2005 bis 2008, mit respektiven Ernten von Winterweizen in den Jahren 2006, 2007 und 2008, festgelegt.

Tabelle 5.8: Spezifikation des Anbaumanagements von Winterweizen.

Fruchtart	Pflug	Aussaat	Düngung	Ernte
Winterweizen	13. Okt.	14. Okt.	31. März 88 kg N	29. Juli
			5. Mai 44 kg N	
			4. Juni 55 kg N	
			17. Juni 33 kg N	

### 5.3.2 Morris-Screening

Der Einsatz des Morris-Screenings erfolgte als vorbereitende Untersuchung zur Identifikation relevanter Modellparameter. Bei der Durchführung der Screening-SA wurde erneut die Konfiguration, wie in Kapitel 5.2.2 beschrieben, eingesetzt (Anzahl der Stufen zur Unterteilung des Untersuchungsraums  $p = 20$ ; Schrittweite  $\Delta = \frac{5}{19}$ ; Anzahl der Parametersamples der Grundgesamtheit  $M = 500$ ; Anzahl der Trajektorien  $j = 40$ ).

In Abbildung 5.4 sind die Ergebnisse des Morris-Screenings exemplarisch für die Outputs *Yield* und  $N_{min}$  dargestellt. Die Abbildung enthält eine Gegenüberstellung der Sensitivitätsmaße  $\mu^*$  und  $\sigma$ . Die Modellparameter wurden durch ihre entsprechenden Nummern (Tabelle 5.1) gekennzeichnet. Das resultierende Parameter-Ranking, welches auf  $\mu^*$  basiert, ist in Tabelle 5.9 dargestellt. Zur Vermeidung der Identifikation irrelevanter Parameter enthält das Ranking nur Parameter, deren  $\mu^*$  größer 0.05 war. Eine vollständige Darstellung der Ergebnisse des Morris-Screenings ist in Abbildung A.3 im Anhang enthalten.

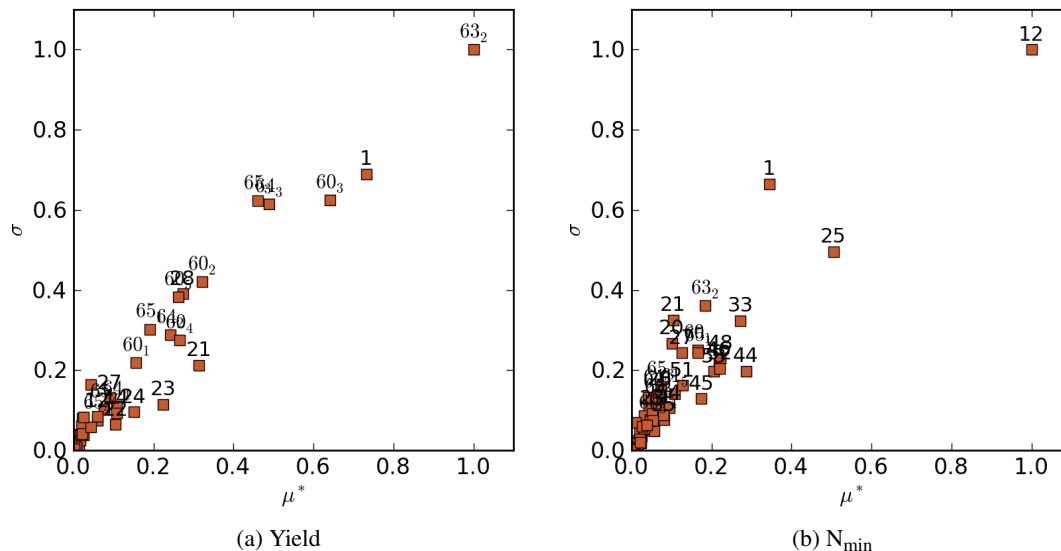
Abbildung 5.4: Ergebnisse des Morris-Screenings. Gegenüberstellung von  $\mu^*$  und  $\sigma$  der untersuchten Modelloutputs.

Tabelle 5.9: Parameter-Ranking der Modellparameter des MONICA-Modells basierend auf den Ergebnissen der Morris-SA für verschiedene Modelloutputs.

No.	Parameter	AGB	Yield	Root	Shoot	Leaf	LAI	GPP	R <sub>a</sub>	NConc	Height	ET <sub>a</sub>	Moist	N <sub>min</sub>	Temp	C <sub>org</sub>
1	maxAssimRate	1	2	2	2	2	4	1	2	10		12	10	3	3	4
6	initRootingDepth														15	
8	rootFormFactor											13				
10	NConcRoot								22							
12	minAvailableN	16	20	12	13	14	15	16	11	5		20		1	16	
14	canopyReflCoef	17	15		18			13	18							
15	saturationBeta											21				
16	stomataCondAlpha											11				
17	stageAtMaxHeight										3					
18	cropHeightP1										2					
19	cropHeightP2										1					
20	luxuryNCoeff													18		
21	maintRespP1	6	6	13	11	13	14	14	13					17	13	18
22	maintRespP2	20	17						19							
23	growthRespP1	7	11		16				16					26		
24	growthRespP2	18	14		19				17							
25	residueNRatio								23	1				2		6
26	minimumNConc	21														
27	nConcB0	14	18	11	10	12	13	11	9	12		19		15	12	
28	nConcPN	3	7	8	6	9	10	9	4	15		14		22	9	11
32	maxCropNDemand													24		
33	nitrRateCoeffStand													5		
35	CNRatioSMB													20		
44	SOMSlowDecCoeffStand									20				4		3
45	SOMFastDecCoeffStand													11		5
46	SMBSlowMaintRateStand													8		7
48	SMBSlowDeathRateStand													6		13
49	SMBFastDeathRateStand															22
51	SOMSlowUtilEff													14		1
52	SOMFastUtilEff													7		8
53	AOMSlowUtilEff													9		9
54	AOMFastUtilEff													19		21
60 <sub>1</sub>	stageTempSum <sub>1</sub>	15	13	9	15	10	11	6	7	14		18		13	8	16
60 <sub>2</sub>	stageTempSum <sub>2</sub>	8	5	4	8	4	6	7	5	6		15	12	23	5	10
60 <sub>3</sub>	stageTempSum <sub>3</sub>	10	3	5	3	3	5	8	6	3		8	9	25	10	14
60 <sub>4</sub>	stageTempSum <sub>4</sub>	13	8	14	7	8	9	15	14	8		7	7		14	20
60 <sub>5</sub>	stageTempSum <sub>5</sub>	12	9			16	17		21	11	4	5	5			
61 <sub>1</sub>	stageKcFactor <sub>1</sub>											9				
61 <sub>2</sub>	stageKcFactor <sub>2</sub>									19		3	3			
61 <sub>3</sub>	stageKcFactor <sub>3</sub>									17		2	2			
61 <sub>4</sub>	stageKcFactor <sub>4</sub>											1	1	21		
61 <sub>5</sub>	stageKcFactor <sub>5</sub>											4	4	16		
63 <sub>2</sub>	vernReq <sub>2</sub>	2	1	1	1	1	1	2	1	2	5	6	6	10	1	2
64 <sub>2</sub>	daylengthReq <sub>2</sub>	19	10	7	12	7	8	12	12	9		22	15		7	17
64 <sub>3</sub>	daylengthReq <sub>3</sub>	9	4	6	4	5	7	10	10	4		10	8		11	15
64 <sub>4</sub>	daylengthReq <sub>4</sub>	22	16	15	17	15	16		20	18		16				
65 <sub>1</sub>	specificLeafArea <sub>1</sub>	5	12	3	5	6	2	3	3	7		17	11	12	2	12
65 <sub>2</sub>	specificLeafArea <sub>2</sub>	11	19	10	9	11	12	5	8	13		23	13		4	
65 <sub>3</sub>	specificLeafArea <sub>3</sub>	4			14		3	4	15	16		24	14		6	19
<b>Anzahl sensitiver Parameter</b>		<b>22</b>	<b>20</b>	<b>15</b>	<b>19</b>	<b>16</b>	<b>17</b>	<b>16</b>	<b>23</b>	<b>20</b>	<b>5</b>	<b>24</b>	<b>14</b>	<b>26</b>	<b>16</b>	<b>22</b>

### 5.3.3 Haupt- und Totaleffekte

Die Berechnung der Haupt- und Totaleffekte mittels der Extended FAST ermöglichte die Quantifizierung der Sensitivität der untersuchten Modellparameter. In den Simulationen der Extended FAST erfolgte eine Analyse nur der Parameter, die beim zuvor durchgeführten Morris-Screening als relevant eingestuft wurden (Tabelle 5.9). Zur Durchführung der Extended FAST wurde die gleiche Konfiguration wie bei der SA verschiedener Fruchtarten verwendet ( $\omega_{max} = 4096$ ,  $M = 4$ ,  $N = 20.000$ ).

Die Ergebnisse der Extended FAST sind in Abbildung 5.5 exemplarisch für *Yield* und  $N_{min}$  dargestellt. Es erfolgte eine Differenzierung zwischen Haupt- und Interaktionseffekten (Kapitel 5.2.3). Die berechneten Totaleffekte sind in Tabelle 5.10 enthalten. Eine vollständige Darstellung der Ergebnisse der Extended FAST befindet sich in Abbildung A.4 im Anhang.

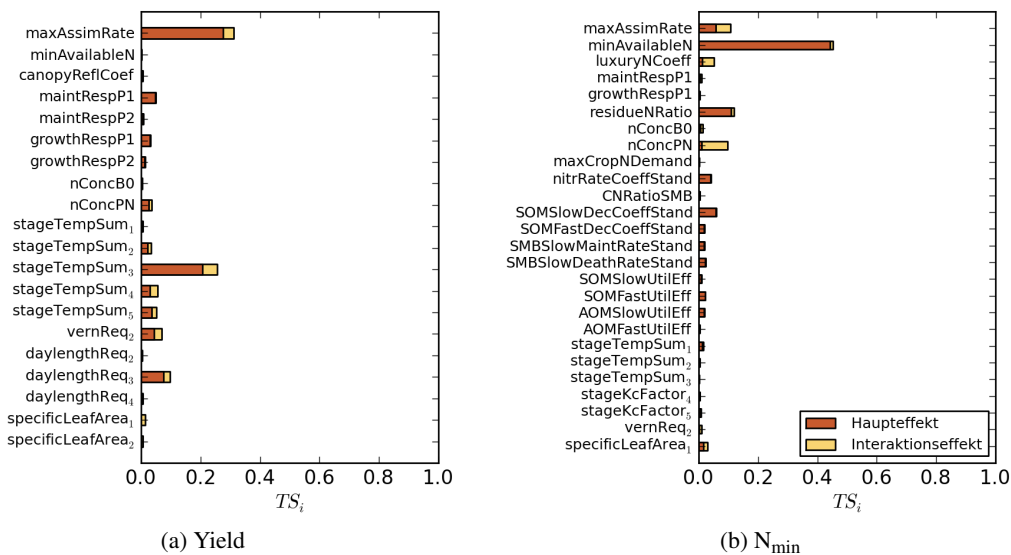


Abbildung 5.5: Quantifizierung der Haupt- und Totaleffekte der untersuchten Modellparameter für die Outputs *Yield* und  $N_{min}$ .

### 5.3.4 Vergleich der Parametersensitivität verschiedener Modelloutputs

Nach Quantifizierung der Parametersensitivität für verschiedene Outputs erfolgte eine vergleichende Analyse der Totaleffekte. In Abbildung 5.6 sind die berechneten Totaleffekte der untersuchten Modellparameter in einem gemeinsamen Überblick dargestellt. Bei der vergleichenden Analyse wurde eine Unterteilung der Outputs in *pflanzen-* und *bodenspezifische* Outputs wie folgt vorgenommen:

- **Pflanzenspezifische Outputs:** AGB, Yield, Root, Shoot, Leaf, LAI, GPP,  $R_a$ , NConc
- **Bodenspezifische Outputs:** Moist,  $N_{min}$ , Temp,  $C_{org}$ .

Tabelle 5.10: Ergebnisse der Extended FAST. Totaleffekte der analysierten Parameter der untersuchten Modelloutputs.

No.	Parameter	AGB	Yield	Root	Shoot	Leaf	LAI	GPP	R <sub>a</sub>	NConc	Height	ET <sub>a</sub>	Moist	N <sub>min</sub>	Temp	C <sub>org</sub>
1	maxAssimRate	0.55	0.31	0.28	0.37	0.2	0.14	0.6	0.46	0.05		0.01	0.02	0.11	0.23	0.16
6	initRootingDepth															
7	specMaxRootDepth															
8	rootFormFactor															
10	NConcRoot															
12	minAvailableN	0.01		0.01	0.01			0.01	0.41					0.45	0.01	
14	canopyRefCoef	0.01	0.01					0.01								
15	saturationBeta															
16	stomataCondAlpha											0.01				
17	stageAtMaxHeight															
18	cropHeightP1										0.31					
19	cropHeightP2										0.71					
20	luxuryNCoeff													0.05		
21	maintRespP1	0.05	0.05	0.01	0.02	0.01	0.01	0.01	0.01					0.01	0.01	0.01
22	maintRespP2	0.01	0.01													
23	growthRespP1	0.03	0.03		0.01			0.01								
24	growthRespP2	0.01	0.01					0.01								
25	residueNRatio									0.25				0.12		0.1
26	minimumNConc															
27	nConcB0	0.01		0.03	0.02	0.02	0.01	0.01	0.03	0.01				0.01	0.02	
28	nConcPN	0.09	0.04	0.05	0.07	0.04	0.03	0.02	0.08	0.08				0.1	0.03	0.02
32	maxCropNDemand															
33	nitrRateCoeffStand													0.04		
35	CNRatioSMB															
44	SOMSlowDecCoeffStand									0.03				0.06		0.13
45	SOMFastDecCoeffStand													0.02		0.05
46	SMBSlowMaintRateStand													0.02		0.02
48	SMBSlowDeathRateStand													0.02		0.01
49	SMBFastDeathRateStand															0.01
51	SOMSlowUtilEff													0.01		0.43
52	SOMFastUtilEff													0.02		0.02
53	AOMSlowUtilEff													0.02		0.02
54	AOMFastUtilEff															0.05
60 <sub>1</sub>	stageTempSum <sub>1</sub>	0.01	0.01	0.02	0.01	0.01	0.01	0.02	0.03	0.01				0.02	0.02	0.01
60 <sub>2</sub>	stageTempSum <sub>2</sub>	0.01	0.03	0.1	0.03	0.08	0.07	0.03	0.03	0.01					0.07	0.01
60 <sub>3</sub>	stageTempSum <sub>3</sub>	0.02	0.26	0.11	0.17	0.18	0.13	0.02	0.03	0.01		0.04	0.02		0.03	0.01
60 <sub>4</sub>	stageTempSum <sub>4</sub>	0.01	0.06	0.01	0.05	0.07	0.05	0.01	0.02	0.01		0.06	0.04		0.01	
60 <sub>5</sub>	stageTempSum <sub>5</sub>	0.02	0.05			0.01	0.01			0.01	0.01	0.09	0.04			
61 <sub>1</sub>	stageKcFactor <sub>1</sub>											0.01				
61 <sub>2</sub>	stageKcFactor <sub>2</sub>									0.02		0.2	0.17			
61 <sub>3</sub>	stageKcFactor <sub>3</sub>									0.02		0.21	0.38			
61 <sub>4</sub>	stageKcFactor <sub>4</sub>											0.29	0.41			
61 <sub>5</sub>	stageKcFactor <sub>5</sub>											0.13	0.1	0.01		
63 <sub>2</sub>	vernReq <sub>2</sub>	0.03	0.07	0.2	0.08	0.17	0.14	0.06	0.07	0.02		0.01	0.01	0.01	0.15	0.03
64 <sub>2</sub>	daylengthReq <sub>2</sub>			0.01		0.01	0.01								0.01	
64 <sub>3</sub>	daylengthReq <sub>3</sub>	0.01	0.1	0.04	0.07	0.07	0.05	0.01	0.01			0.01	0.01		0.01	0.01
64 <sub>4</sub>	daylengthReq <sub>4</sub>		0.01			0.01	0.01					0.01				
65 <sub>1</sub>	specificLeafArea <sub>1</sub>	0.05	0.01	0.12	0.07	0.07	0.1	0.13	0.13	0.02		0.01	0.01	0.03	0.21	0.03
65 <sub>2</sub>	specificLeafArea <sub>2</sub>	0.04	0.01	0.04	0.06	0.03	0.02	0.06	0.06	0.01			0.01		0.17	
65 <sub>3</sub>	specificLeafArea <sub>3</sub>	0.06			0.01		0.17	0.03	0.01	0.01					0.07	0.01

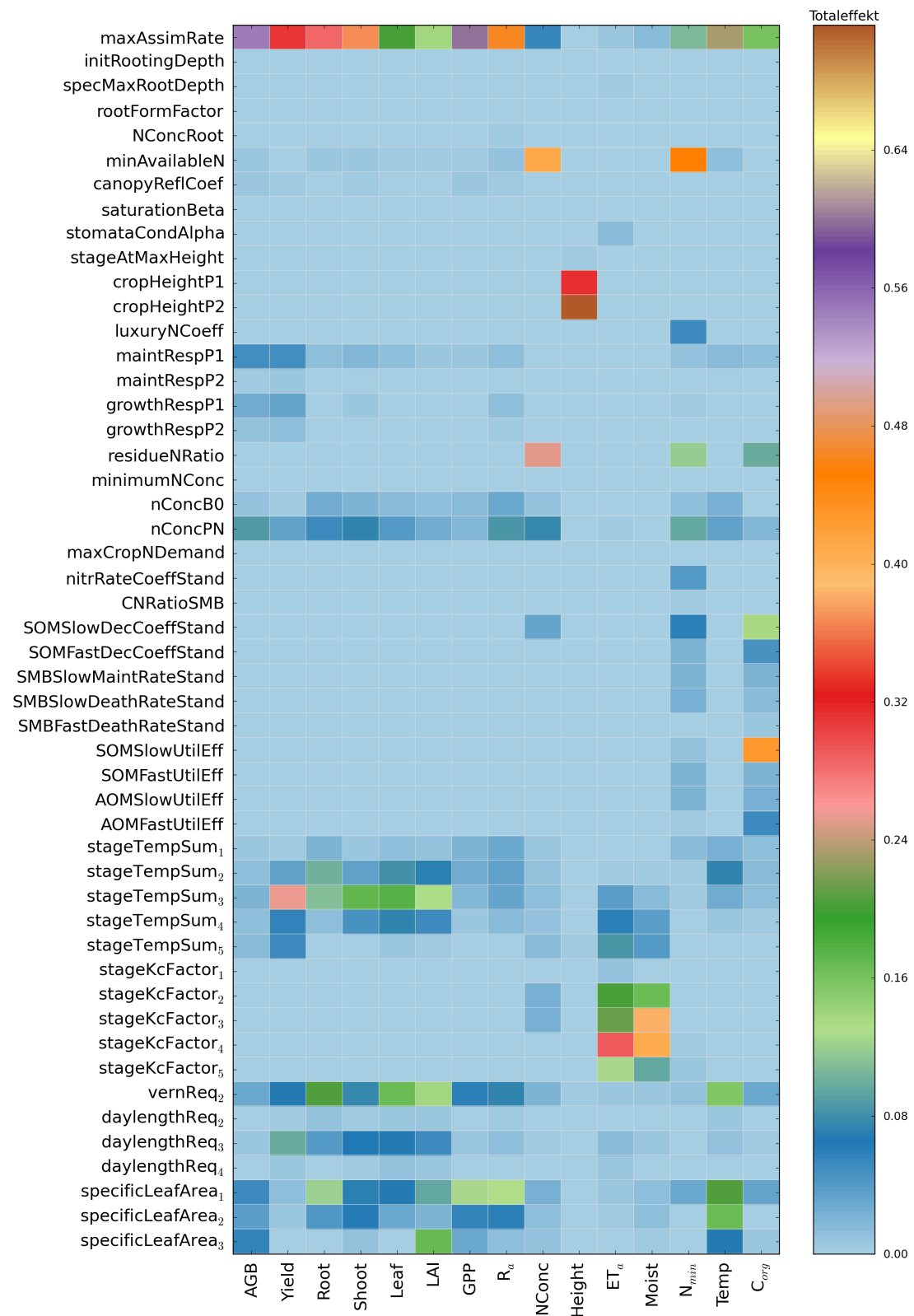


Abbildung 5.6: Gegenüberstellung der berechneten Totaleffekte der untersuchten Modelloutputs am Beispiel von Winterweizen.

In den Auswertungen erfolgte ein Ausschluss der Pflanzenhöhe (Height) von den pflanzenspezifischen Outputs, da sich die Berechnung des Outputs erheblich von den übrigen pflanzenspezifischen Outputs unterschied. Der in MONICA realisierte Algorithmus zur Berechnung der Höhe ist im Vergleich zur Photosynthese trivial und unabhängig von der gebildeten Biomasse. Die Pflanzenhöhe ist ausschließlich von der aktuellen Temperatursumme und den Parametern *cropHeightP1*, *cropHeightP2* und *stageAtMaxHeight* abhängig. Aus diesem Grund wurde Height von den folgenden Analysen ausgenommen.

Die Evapotranspiration ( $ET_a$ ) berechnet sich aus der Transpiration der Pflanze und der Evaporation des Bodens. Damit ließe sich der Output beiden Gruppen zuordnen und wurde deshalb aus der folgenden Untersuchung ausgeschlossen.

#### 5.3.4.1 Pflanzenspezifische Outputs

Bei den pflanzenspezifischen Outputs war der Parameter *maxAssimRate* hochgradig sensitiv. Weiterhin waren *nConcB0*, *nConcPN*, *stageTempSum1 - stageTempSum4*, *vernReq2*, *specificLeafArea1* und *specificLeafArea2* einflussreich. Die Parameter der Erhaltungs- und Wachstumsatmung (*maintRespP1*, *maintRespP2*, *growthRespP1*, *growthRespP2*) waren für AGB und Yield einflussreicher als für die restlichen Outputs. Die N-Konzentration in der oberirdischen Biomasse (NConc) wurde stark von *minAvailableN* und *residueNRatio* beeinflusst. Auf die anderen Outputs hatten diese Parameter nur einen minimalen bzw. keinen Einfluss.

In einer weiteren Analyse erfolgte die paarweise Gegenüberstellung der Parametersensitivitäten einzelner Outputs. Ziel dieser Untersuchung war es, Ähnlichkeiten zwischen Parametersensitivitäten verschiedener Outputs zu identifizieren. Das Ergebnis der Gegenüberstellung ist in Abbildung 5.7 dargestellt. Zur besseren Kennzeichnung der Übereinstimmung von Parametersensitivitäten zweier Outputs erfolgte eine farbliche Gestaltung der Hintergründe der Grafiken in Abhängigkeit vom Übereinstimmungsgrad. Die Grafiken der Outputs mit ähnlichen Parametersensitivitäten ( $R^2 \geq 0.7$ ) wurden mit einem grünen Hintergrund hinterlegt. Grafiken der Outputs mit abweichenden Parametersensitivitäten ( $R^2 < 0.7$ ) wurden mit einem roten Hintergrund hinterlegt.

Die Parametersensitivitäten von AGB wiesen hohe Ähnlichkeiten mit denen von *Shoot* ( $R^2 = 0.78$ ), *GPP* ( $R^2 = 0.95$ ) und  $R_a$  ( $R^2 = 0.94$ ) auf. Für *Yield* wurden ähnlich sensitive Parameter wie für *Shoot* und *Leaf* ermittelt. Die sensitiven Parameter des Wurzelwachstums (Root) glichen denen von *Shoot*, *Leaf* und  $R_a$ . Das Sprosswachstum (*Shoot*) wies ähnliche Sensitivitäten mit AGB, *Yield*, *Root*, *Leaf*, *GPP* und  $R_a$  auf. Die sensitiven Parameter der Blattbiomasse waren denen des Ertrags, Wurzel- und Sprossbiomasse ähnlich. Der LAI wies keine Ähnlichkeiten der Parametersensitivitäten mit anderen Outputs auf ( $R^2 \geq 0.7$ ). Für *GPP* waren die Parametersensitivitäten von  $GPP \times AGB$ ,  $GPP \times Shoot$  und  $GPP \times R_a$  besonders ähnlich. Die sensitiven Parameter von  $R_a$  glichen denen von AGB, *Root*, *Shoot*, und *GPP*.

#### 5.3.4.2 Bodenspezifische Outputs

Im Vergleich zu den pflanzenspezifischen Outputs war *maxAssimRate* bei den bodenspezifischen Outputs zwar sensitiv, besaß aber einen deutlich geringeren Einfluss. Eine signifikante Sensitivität von *maxAssimRate* wurde für  $N_{min}$ , Temp und  $C_{org}$  ermittelt. Der Einfluss auf den Bodenwassergehalt (Moist) war jedoch gering.

Minimale Gemeinsamkeiten in Parametersensitivitäten ließen sich zwischen  $N_{min}$  und  $C_{org}$  ableiten. Beide Outputs wurden verstärkt von den Parametern zur Beschreibung der Umsetzungsraten

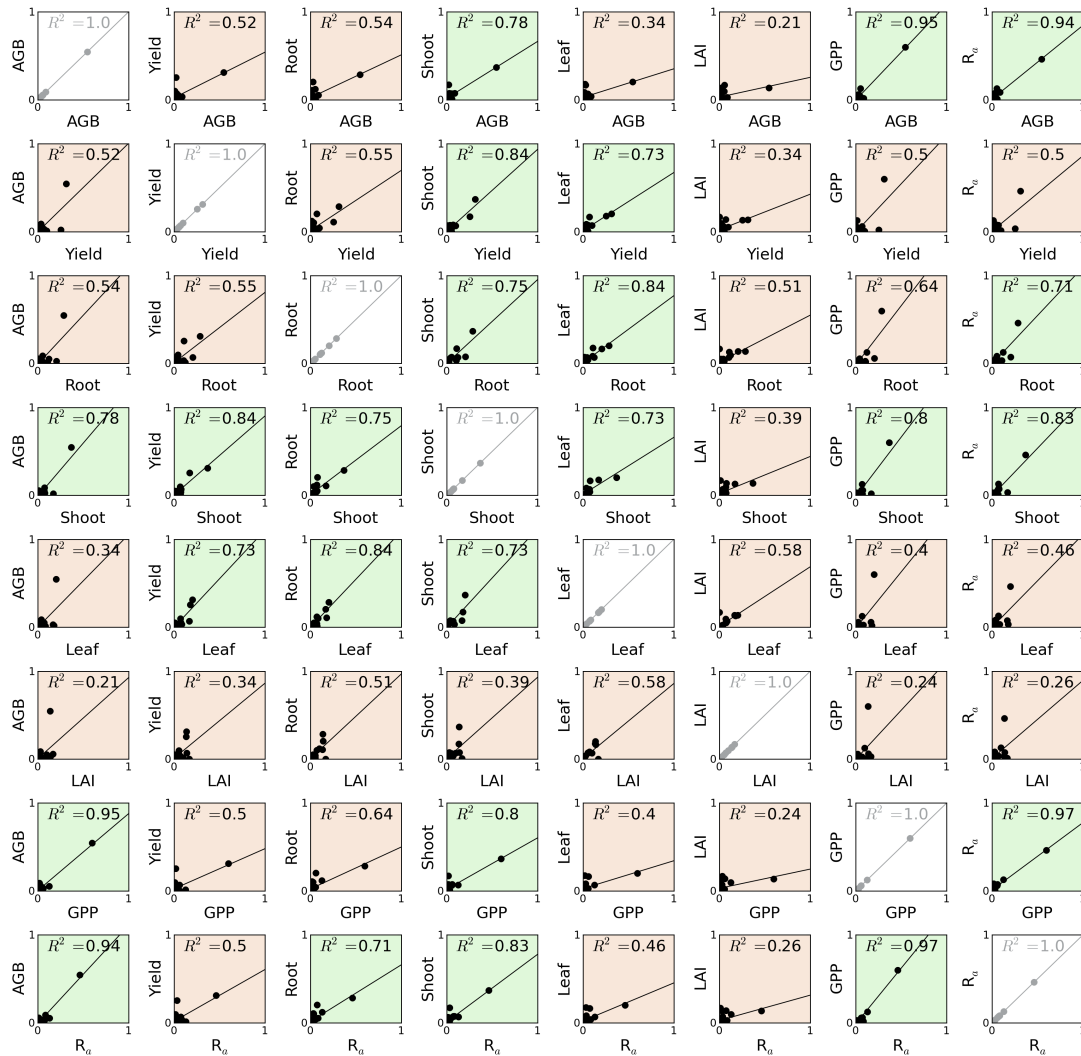


Abbildung 5.7: Gegenüberstellung der Totaleffekte bei der Simulation von Winterweizen zweier pflanzenspezifischer Outputs in Form von Scatterplots.

der verschiedenen C-Pools im Boden beeinflusst. Bei der Bodentemperatur (Temp) waren verschiedene Parameter, die hohen Einfluss auf das Wachstum der Pflanze hatten, relevant. Besonders hoch war dabei der Einfluss der Parameter der spezifischen Blattfläche (*specificLeafArea*<sub>1</sub> - *specificLeafArea*<sub>3</sub>).

Die Gegenüberstellung der bodenspezifischen Outputs (Abbildung 5.8) verdeutlichte, dass die untersuchten Outputs durch unterschiedliche Parameter beeinflusst wurden. Gemeinsame Parametersensitivitäten mehrerer bodenspezifischer Outputs ließen sich anhand dieser Gegenüberstellung nicht ableiten.

### 5.3.5 Untersuchung der Zeitabhängigkeit der Parametersensitivitäten

In dieser Arbeit erfolgte die Analyse der allgemeinen Parametersensitivität hinsichtlich verschiedener Outputs bisher auf Basis von gemittelten Output-Werten eines 4-jährigen Simulationszeit-



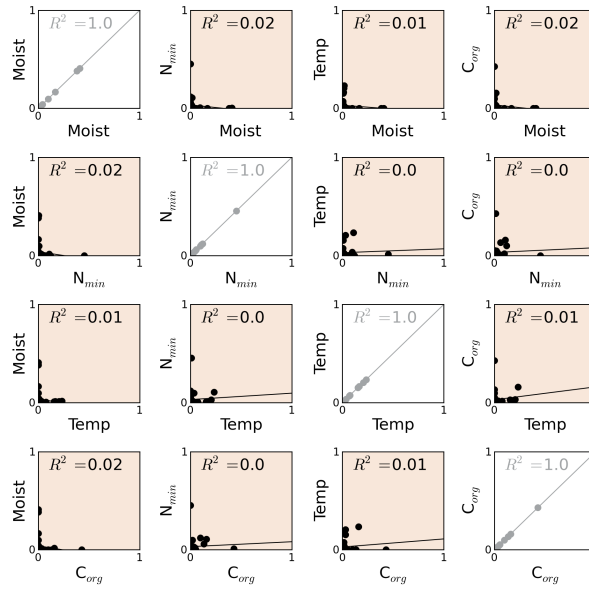


Abbildung 5.8: Gegenüberstellung der Totaleffekte bei der Simulation von Winterweizen von jeweils zwei bodenspezifischen Outputs in Form von Scatterplots.

raums. In einer weiterführenden Analyse wurde die Fragestellung nach der Veränderung der Parametersensitivitäten während der Simulationszeit zur Vertiefung des Prozessverständnisses von MONICA untersucht.

Zur Realisierung dieser Analyse wurde zunächst eine Extended FAST mit der zuvor gewählten Konfiguration (siehe Kapitel 5.3.3,  $\omega_{max} = 4096$ ,  $M = 4$ ,  $N = 20.000$ ) am Beispiel von Winterweizen (Anbauinformationen in Tabelle 5.8) durchgeführt. Im Unterschied zur vorangegangenen SA erfolgte bei dieser zeitabhängigen Untersuchung zu jedem Simulationszeitschritt die Berechnung des Haupteffekts der untersuchten Parameter. Die Parameter *stageTempSum*<sub>1</sub> - *stageTempSum*<sub>6</sub>, *vernReq*<sub>2</sub> und *daylengthReq*<sub>2</sub> - *daylengthReq*<sub>4</sub> wurden von dieser Untersuchung ausgeschlossen, da sie einen Einfluss auf die zeitliche Entwicklung der Pflanze haben. Dieser Schritt war notwendig, um eine zeitlich gleich bleibende Pflanzenentwicklung zu garantieren.

Zur Analyse der zeitlichen Variation der Parametersensitivität wurde ein Untersuchungszeitraum von einem Jahr, beginnend am 1.10.2006 bis zum 30.09.2007, gewählt. In Abbildung 5.9 sind die täglichen Temperaturwerte (minimale, maximale und durchschnittliche Lufttemperatur), Niederschlag und Globalstrahlung des Untersuchungszeitraums, die als Input der Simulation dienten, abgebildet. Diese Informationen werden in der folgenden Auswertung bei der Interpretation der Ergebnisse benötigt.

Aufgrund der Variation der Modellparameter wurde in den Auswertungen zur Quantifizierung des Einflusses der resultierende Mittelwert und die Standardabweichung (STD) berechnet. Es erfolgte die Ermittlung der normierten Standardabweichung nSTD als Maß der relativen Abweichung bezogen auf den Mittelwert des Outputs. nSTD eines Outputs zu einem Simulationszeitpunkt  $t$  berechnet sich aus

$$nSTD_o(t) = \frac{STD_o(t)}{MEAN_o(t)} \quad (5.1)$$

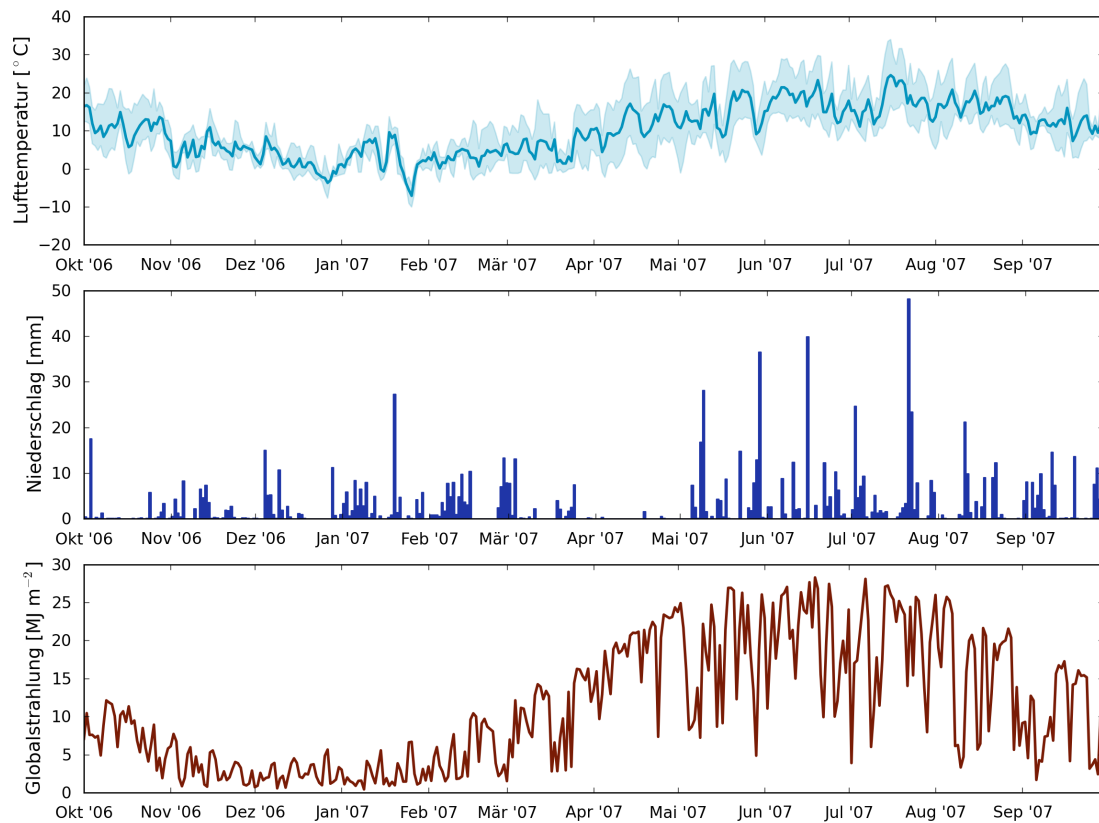


Abbildung 5.9: Klimatische Eingangsdaten der Simulationen.

mit  $STD_o(t)$  als Standardabweichung und  $MEAN_o(t)$  des Outputs  $o$  jeweils zum Zeitpunkt  $t$ .  $nSTD$  stellt ein Maß für den Einfluss der untersuchten Parameter dar. Je höher  $nSTD$  desto stärker wirkte sich die Parameter-Variation auf den untersuchten Output aus.

## AGB

In Abbildung 5.10 (oben) ist die Entwicklung der oberirdischen Biomasse, die resultierende Standardabweichung sowie die  $nSTD$  für den Output AGB dargestellt. Die maximale Abweichung der AGB aufgrund der Parametervariation betrug  $2 \text{ t ha}^{-2}$ . Obwohl mit zunehmender Pflanzenentwicklung die Abweichungen der AGB ansteigen (STD), zeigt eine Analyse der  $nSTD$ , dass die relativen Abweichungen, verursacht durch die Veränderung der Modellparameter, bezogen auf den Ertrag sinken.

Die darunterliegende Grafik in Abbildung 5.10 enthält die Darstellung des zeitlichen Verlaufs des Haupteffekts der analysierten Parameter *maxAssimRate*, *maintRespP1*, *growthRespP1*, *nConcB0* und *nConcPN*. *maxAssimRate* war für den größten Teil der Pflanzenentwicklung der wichtigste Parameter. Die sensitive Phase für *maxAssimRate* begann ab dem Eintritt in das zweite Entwicklungsstadium (Auflaufen der Pflanze, Tabelle 5.11). Mit zunehmender Pflanzenentwicklung stieg der Einfluss von *nConcPN*. Ab dem fünften Entwicklungsstadium – mit Ausnahme einer kurzen Phase zu Beginn des dritten Entwicklungsstadiums – war *maxAssimRate* der dominanteste Parameter. Für den betrachteten Untersuchungsausschnitt waren *maintRespP1* und *growthRespP1* erst in den späteren Entwicklungsstadien von Winterweizen sensitiv.

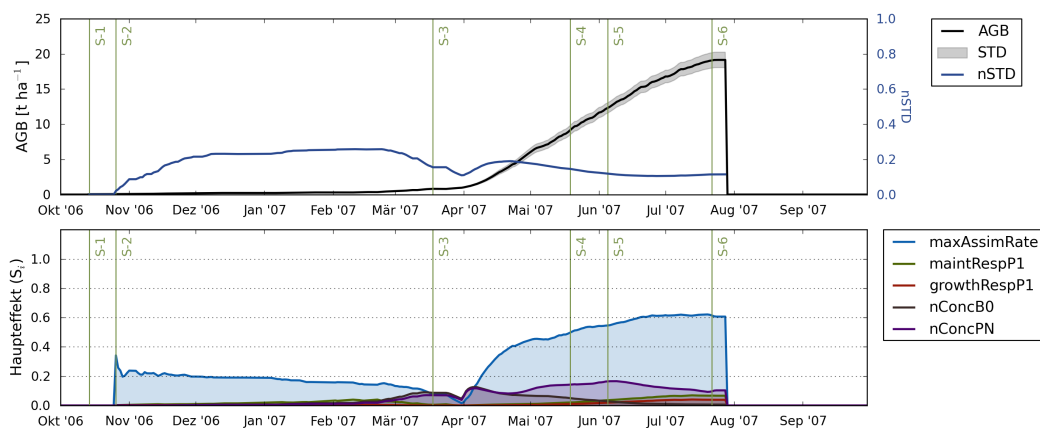


Abbildung 5.10: Entwicklung der oberirdischen Biomasse und der resultierenden Standardabweichung (oben) sowie der Parametersensitivität (unten) beim Anbau von Winterweizen.

## Yield

Abbildung 5.11 stellt die Entwicklung des Kornertrags von Winterweizen nach dem durchgeführten Parameter-Sampling dar. Es ist deutlich zu sehen, dass die Entwicklung des Kornes erst mit dem Eintritt in das vierte Entwicklungsstadium (Blüte, Tabelle 5.11) begann. Aus diesem Grund waren die untersuchten Parameter erst ab diesem Zeitpunkt sensitiv.

*maxAssimRate* war während der gesamten Ertragsentwicklung der relevanteste Parameter. Der Einfluss von *maxAssimRate* zeigte eine deutliche Abhängigkeit von der Globalstrahlung (Abbildung 5.9). Am 29. Mai 2007 wurden nur  $4.8 \text{ MJ m}^{-2}$  gemessen. Für diesen Tag sank der Haupteffekt von *maxAssimRate* von 0.27 auf 0.16. Im Gegensatz dazu stieg für diesen Tag der Einfluss der Wachstums- und Erhaltungsatmungsparameter (*growthRespP1*, *maintRespP1*) an.

Tabelle 5.11: Beschreibung der Entwicklungsstadien von Winterweizen.

Abk.	Stadium	Beschreibung
S-1	1	Aussaat bis Auflaufen
S-2	2	Auflaufen bis Doppelring
S-3	3	Doppelring bis Blühbeginn
S-4	4	Blüte
S-5	5	Kornfüllung
S-6	6	Seneszenz

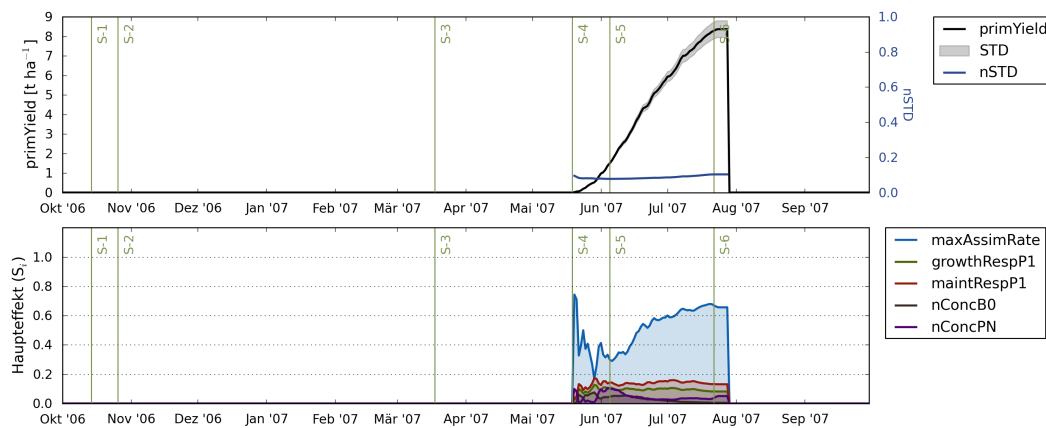


Abbildung 5.11: Darstellung der Ertragsentwicklung sowie der Parametersensitivität beim Anbau von Winterweizen

## Root

Das Parameter-Sampling verursachte beim Wachstum der Wurzelbiomasse eine maximale Abweichung von  $0.34 \text{ t ha}^{-1}$  (STD, Abbildung 5.12). Obwohl die Wurzelbiomasse während der Pflanzenentwicklung bis zum Eintritt in das 5. Entwicklungsstadium wächst und die absoluten Abweichungen steigen, sinkt die relative Abweichung. Damit zeichnet sich ein sinkender Einfluss der Parameter auf die Entwicklung der Wurzelbiomasse mit zunehmender Pflanzenentwicklung ab.

In der frühen Wurzelentwicklung (S-2 - S-3) wurde das Wachstum vorwiegend durch den Parameter  $\text{specificLeafArea}_1$  beeinflusst.  $\text{maxAssimRate}$  war deutlich weniger einflussreich. Erst ab der Mitte des dritten Entwicklungsstadiums wechselte die Sensitivität der Parameter, wobei  $\text{maxAssimRate}$  in der späteren Phase der Wurzelbiomasseentwicklung am relevantesten war. Ab dem 5. Stadium wächst die Wurzelbiomasse des Winterweizens aufgrund der Parameterkonfiguration von MONICA nicht weiter an. Dies spiegelt sich ebenfalls in der konstant bleibenden Sensitivität der Parameter ab diesem Zeitpunkt wider.

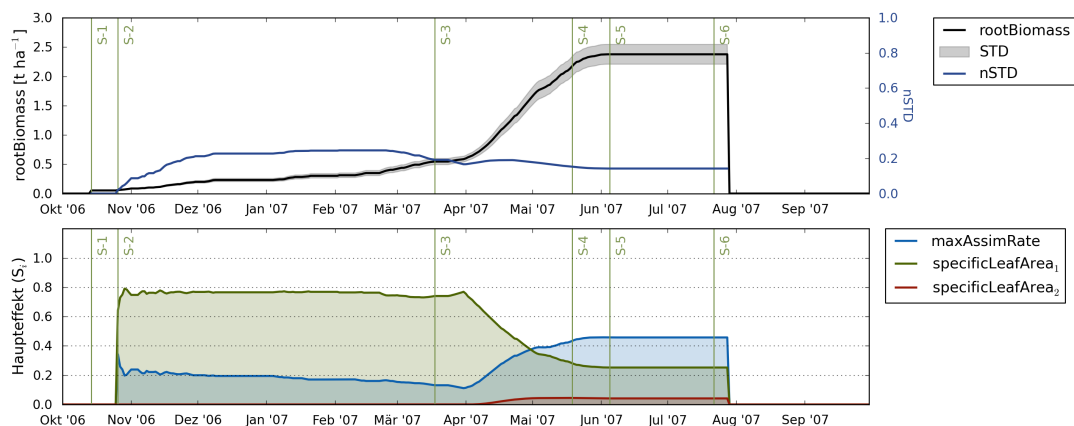


Abbildung 5.12: Entwicklung der Wurzelbiomasse sowie der Parametersensitivität des Wurzelwachstums beim Anbau von Winterweizen.

## GPP

In Zeiten hoher Globalstrahlung in der fortgeschrittenen Pflanzenentwicklung waren die absoluten Abweichungen der GPP, verursacht durch das Parameter-Sampling, besonders hoch (Abbildung 5.13). Generell zeigte sich eine lineare Abhängigkeit von GPP und Globalstrahlung ( $R^2 = 0.86$ ). Die resultierende Standardabweichung betrug maximal  $30 \text{ kg C m}^{-2}$ . Die Analyse von nSTD zeigt jedoch, dass der Einfluss der Parameter auf GPP mit zunehmender Pflanzenentwicklung sinkt.

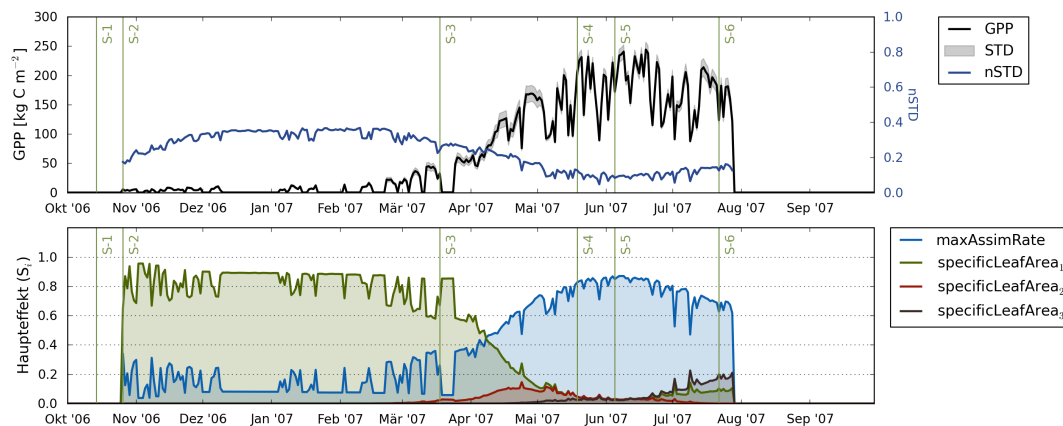


Abbildung 5.13: Entwicklung des photosynthetisch erzeugten Bruttoprimärprodukts (GPP) der Pflanze sowie der Parametersensitivität von GPP beim Anbau von Winterweizen.

Wie zuvor bei AGB und Root beobachtet, begann der Einfluss der Parameter auf GPP erst ab dem Auflaufen von Winterweizen (2. Stadium). Hier war der Parameter *specificLeafArea*<sub>2</sub> am einflussreichsten. Erst im dritten Stadium änderte sich die Reihenfolge der sensitiven Parameter, wobei *maxAssimRate* während der fortgeschrittenen Pflanzenentwicklung den größten Einfluss aufwies. Die Parametersensitivität von *maxAssimRate* zeigte mit einem  $R^2 = 0.76$  eine hohe lineare Abhängigkeit von der Globalstrahlung. *specificLeafArea*<sub>2</sub> besaß im 3. Stadium einen signifikanten Einfluss, der jedoch mit zunehmender Pflanzenentwicklung sank. Der Parameter *specificLeafArea*<sub>3</sub> beeinflusste, obwohl er nur für das dritte Stadium aktiv war, sogar im 5. und 6. Stadium die GPP.

## R<sub>a</sub>

In der frühen Phase der Pflanzenentwicklung (2. Stadium) wurde die Gesamtatmung der Pflanze am stärksten durch die Parameter *specificLeafArea*<sub>1</sub> und *maintRespP1* beeinflusst (Abbildung 5.14). Es zeigte sich, dass in Phasen photosynthetischer Inaktivität aufgrund niedriger Globalstrahlung und Temperaturwerte der Einfluss der Parameter der Erhaltungsatmung – und zu einem geringeren Maße auch der Einfluss der Wachstumsatmung – anstieg (Abbildung 5.13). Insgesamt wurde ein exponentieller Zusammenhang von R<sub>a</sub> und der Globalstrahlung ermittelt. In Zeiten der aktiven Photosynthese im zweiten Stadium nahm die Sensitivität von *specificLeafArea*<sub>1</sub> zu. Obwohl der Parameter *specificLeafArea*<sub>1</sub> nur im ersten Entwicklungsstadium im Modell verwendet wird, wirkte sich der Einfluss des Parameters auf R<sub>a</sub> bis in die späte Pflanzenentwicklung aus.

Der Einfluss von *maxAssimRate* war in der frühen Pflanzenentwicklung tendenziell konstant, jedoch war der Parameter in dieser Phase deutlich weniger sensitiv als *specificLeafArea*<sub>1</sub> und *maintRespP1*. Erst während des dritten Entwicklungsstadiums nahm die Sensitivität von *maxAssimRate* zu. Parallel zu *maxAssimRate* stieg in einem geringeren Maße der Einfluss von *nConcPN*.

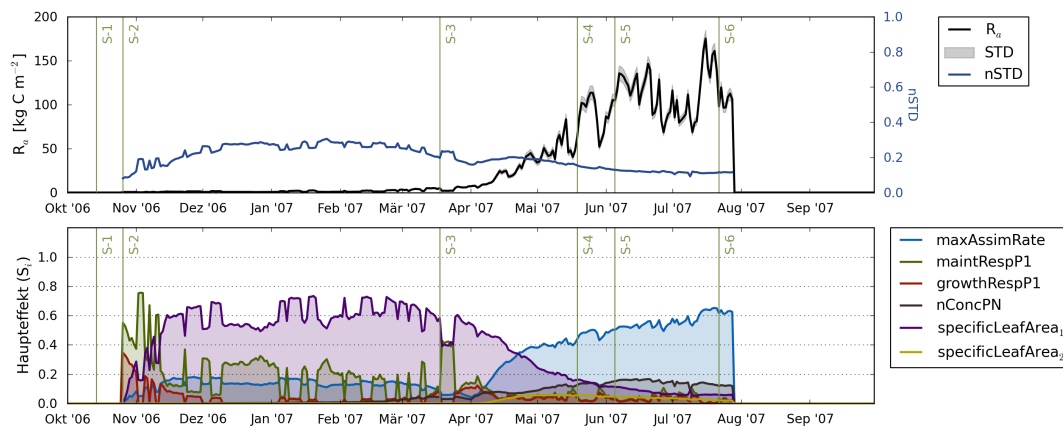


Abbildung 5.14: Entwicklung der Gesamtatmung der Pflanze sowie der Parametersensitivität von  $R_a$  beim Anbau von Winterweizen.

### Moist

Der Einfluss der Pflanze auf den Bodenwassergehalt wuchs mit fortschreitender Pflanzenentwicklung (Abbildung 5.15). Innerhalb des Zeitraums vom 3. bis zum 6. Entwicklungsstadium wirkte sich die Variation der Parameter verstärkt auf den Bodenwassergehalt aus und verursachte eine maximale Standardabweichung von  $1.5 \text{ m}^3 \text{ m}^{-3}$ .

Im zweiten Stadium war im Vergleich zu anderen Parametern  $stageKcFactor_2$  besonders sensitiv, auch wenn die Variation der Parameter in diesem Zeitabschnitt keine signifikante Varianz des Wassergehalts verursachte ( $STD=0$ ). Mit zunehmender Pflanzenentwicklung stieg die Sensitivität der  $K_c$ -Faktoren der späteren Entwicklungsstadien an.

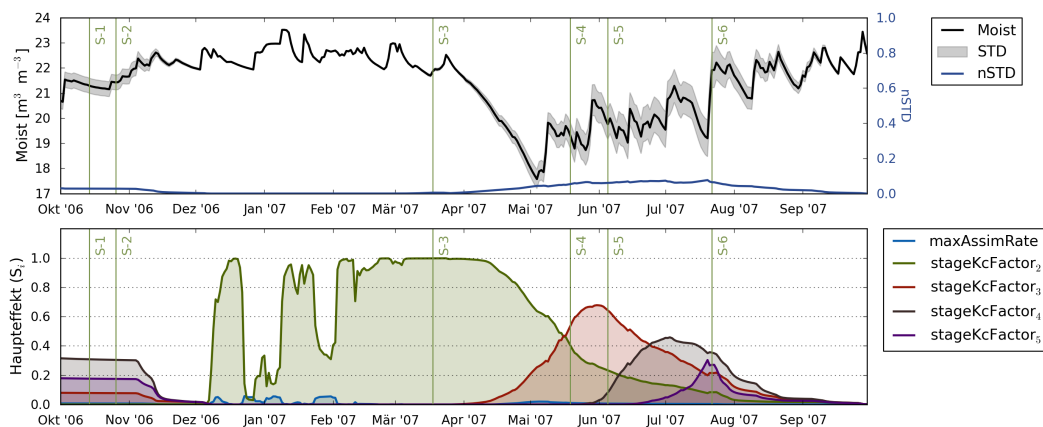


Abbildung 5.15: Entwicklung des Bodenwassergehalts sowie der Parametersensitivität des Outputs beim Anbau von Winterweizen.

Es zeigte sich, dass der Bodenwassergehalt auch nach der Ernte von Winterweizen (Okt. 2006 oder Aug. 2007) nachträglich von den  $K_c$ -Faktoren beeinflusst wurde. Die  $K_c$ -Faktoren regulieren die Höhe der aktuellen Evapotranspiration der Pflanze. Das von den Pflanzen benötigte Wasser wird dem Boden entzogen. Je höher der Wert der  $K_c$ -Faktoren, desto höher die aktuelle Evapotranspiration und desto weniger Wasser verbleibt im Boden. Aufgrund dieses Zusammenhangs lässt sich

der Einfluss der  $K_c$ -Faktoren auch nach der Ernte des Winterweizens erklären.

### $N_{\min}$

Der  $N_{\min}$ -Gehalt im Boden wurde auch nach dem Anbau von Winterweizen stark von pflanzen-spezifischen Parametern beeinflusst (Abbildung 5.16). Der Einfluss von *minAvailableN* war nach der Ernte bzw. in der späteren Phase der Pflanzenentwicklung ab dem 4. Entwicklungsstadium besonders hoch. Die hohen Spitzen beim  $N_{\min}$ -Gehalt wurden durch die angewandte mineralische N-Düngung verursacht (Tabelle 5.8).

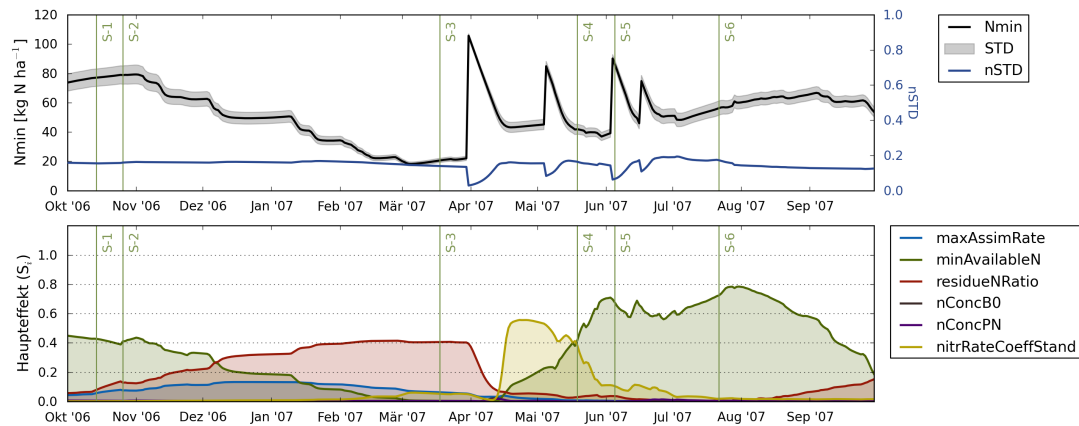


Abbildung 5.16: Entwicklung des  $N_{\min}$ -Gehalts im Boden sowie der Parametersensitivität des Outputs beim Anbau von Winterweizen.

Der Einfluss von *residueNRatio*, der das Verhältnis der N-Konzentration der Ernterückstände und des marktreifen Ertrags beschreibt, stieg nach der Ernte aufgrund des Verbleibs der Ernterückstände im Boden. Die Sensitivität des Parameters blieb bis in die frühe Entwicklungsphase der nachfolgenden Frucht hoch. Im dritten Entwicklungsstadium wies *nitrRateCoeffStand* eine hohe Sensitivität auf, die jedoch mit zunehmender Pflanzenentwicklung sank. Die Parameter *nConcB0* und *nConcPN* besaßen für den untersuchten Zeitabschnitt keinen Einfluss auf  $N_{\min}$ .

### Temp

Die Bodentemperatur ist abhängig vom Bodenbedeckungsgrad der Pflanze, was durch hohe Sensitivitäten der Parameter der spezifischen Blattfläche belegt wurde (Abbildung 5.17). Im zweiten Entwicklungsstadium wurde die Bodentemperatur am stärksten durch *specificLeafArea1* beeinflusst. Der Parameter ist im ersten Entwicklungsstadium der Pflanze aktiv und reguliert die Höhe der während der Photosynthese gebildeten Assimilate.

Mit zunehmender Pflanzenentwicklung sank die Sensitivität von *specificLeafArea1*, der Einfluss von *specificLeafArea2* und *specificLeafArea3* stieg. Es zeigte sich deutlich, dass die Bodentemperatur auch nach der Ernte von Winterweizen stark vom Anbau der Frucht beeinflusst wurde, da die Modellparameter auch nach der Ernte Einfluss auf die Bodentemperatur ausübten.



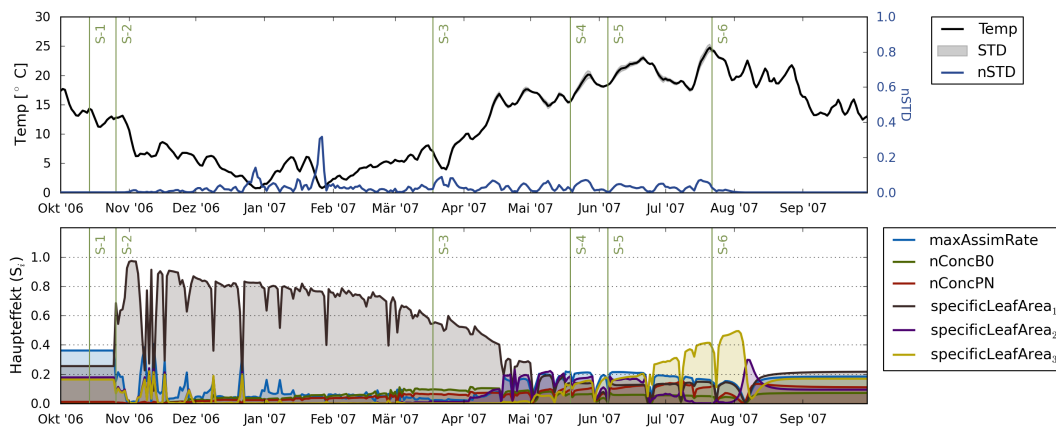


Abbildung 5.17: Verlauf der Bodentemperatur sowie der Parametersensitivität des Outputs beim Anbau von Winterweizen.

### $C_{org}$

Der Gehalt des organischen Kohlenstoffs im Boden stieg nach der Ernte von Winterweizen – aufgrund des Verbleibs der Ernterückstände im und auf dem Boden – deutlich an (Abbildung 5.18). Während des gesamten Untersuchungszeitraums wirkte sich die Variation der Modellparameter auf den  $C_{org}$ -Gehalt aus ( $STD > 0$ ).

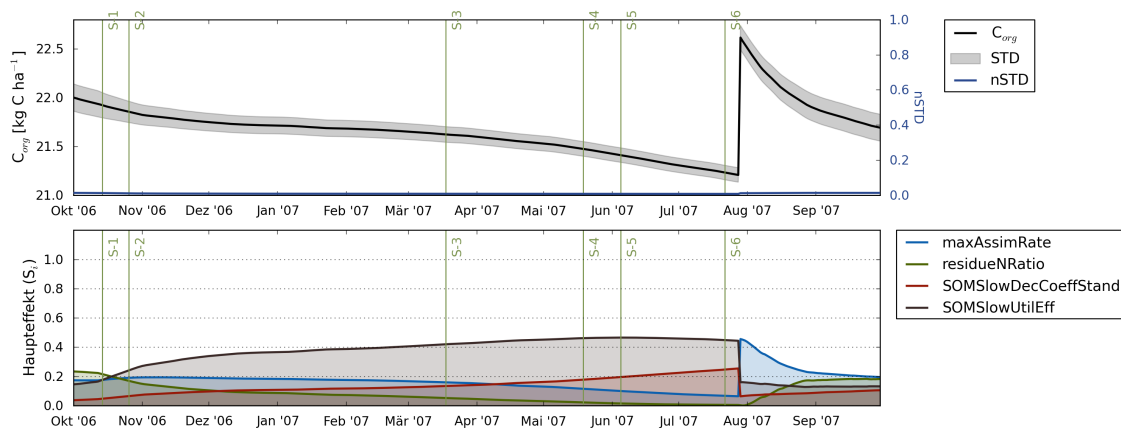


Abbildung 5.18: Verlauf des  $C_{org}$ -Gehalts im Boden sowie der Parametersensitivität des Outputs beim Anbau von Winterweizen.

Erst nach der Ernte von Winterweizen war *maxAssimRate* sensitiv. Bei der Ernte wurde das gebildete Korn abtransportiert. Der Rest der Biomasse wie z.B. Stroh und Blätter verblieb auf dem Boden und bildete die Grundlage zur Anreicherung des Bodens mit organischem C. Je höher die gebildete Biomasse während der Pflanzenentwicklung, desto höher die Menge an organischem Kohlenstoff, die nach der Ernte dem Boden zurückgeführt wurde. Da das Wachstum der Biomasse am stärksten durch *maxAssimRate* beeinflusst wurde (Vergleich AGB und Yield), wies der Parameter für  $C_{org}$  nach der Ernte eine hohe Sensitivität auf.

Der zugeführte organische Kohlenstoff im Boden wurde mit fortschreitender Simulationsdauer durch Bodenorganismen abgebaut und mineralisiert. Dadurch sank der  $C_{org}$ -Gehalt im Boden.



Aufgrund des Abbaus verringerte sich mit zunehmender Simulationsdauer der Einfluss von *maxAssimRate*. Die Sensitivität der Parameter zur Beschreibung der Abbauraten der organischen Bodensubstanz (*SOMSlowDecCoeffStand* und *SOMSlowUtilEff*) stieg nach der Ernte kontinuierlich an.

## 5.4 Speed-Up der Parallelisierung

Bei der Durchführung der SA waren die wiederholten Modellevaluierungen besonders zeitintensiv. Zur Minimierung der gesamten Ausführungszeit erfolgte eine parallele Ausführung der SA unter Verwendung mehrerer Prozessoren (Kapitel 4.2.4.2). Am Beispiel der Extended FAST wird die durch die Parallelisierung erzielte Zeitersparnis demonstriert.

Wie in Kapitel 4.2.4.2 bereits erwähnt besteht jedes Computerprogramm aus einem sequentiellen und einem parallelen Programmteil (Ahmdal 1967). Im Fall der am MONICA-Modell realisierten SA beinhaltete der sequentielle Programmteil die Erzeugung der Parameter-Samples und die Berechnung der Sensitivitätsmaße. Der parallele Programmteil beinhaltete die Durchführung der Modellevaluierungen für alle Parameter-Samples.

Es erfolgte die Ermittlung der Ausführungszeit bei der Analyse eines Parameters in Abhängigkeit von der eingesetzten Prozessorenanzahl unter Verwendung der Formel 4.17. Die Ausführungszeit des sequentiellen Programmteils betrug  $t_{seq} = 3s$ . Die Durchführung einer Modellsimulation für ein Parameter-Sample benötigte 0,85 Sekunden ( $t_{sim} \approx 0,85s$ ). Die Berechnung des Totaleffekts eines Parameters für einen Modelloutput erfolgte auf Basis von  $N = 20.000$  Parameter-Samples. Damit betrug  $t_p = N \cdot t_{sim} = 17.011s$ . Die Ausführungszeit der abhängigen Operationen zwischen den einzelnen Prozessoren war für diese Untersuchungen gleich Null ( $t_o(p) = 0$ ), da die parallel ausgeführten Modellevaluierungen unabhängig voneinander waren und keine Kommunikation der Prozessoren untereinander während der Berechnungen erforderlich war. Unter der Verwendung eines Prozessors benötigte die Analyse eines Parameters eine maximale Ausführungszeit von  $t_1 = t_{seq} + t_p = 3s + 17.011s \approx 284min \approx 4,7h$ .

Da in der SA des MONICA-Modells sowohl mehrere Outputs als auch mehrere Parameter je Output untersucht wurden, würde die reale Ausführungszeit aller Untersuchungen bei Verwendung eines Prozessors ein Vielfaches von  $t_1$  betragen.

Zur Quantifizierung der Zeitersparnis, die durch die Parallelisierung erzielt wurde, erfolgte die Berechnung des Speed-Ups. Abbildung 5.19 enthält eine Darstellung der Veränderung der Ausführungszeit bei der Verwendung von einer unterschiedlichen Anzahl an Prozessoren sowie des resultierenden Speed-Ups. Beim Einsatz eines Prozessors wurden ca. 4,7 Stunden für die Analyse eines Parameter benötigt. Es erfolgte eine Reduktion der Ausführungszeit auf 9 Minuten bei der Verwendung von 48 Prozessoren. Obwohl diese Zeitersparnis erheblich ist, zeigt die Analyse des Speed-Ups, dass die Steigerung von 32 ( $t_{32} = 9 \text{ min}$ ) auf 48 ( $t_{48} = 9 \text{ min}$ ) Prozessoren zu keiner wesentlichen Erhöhung des Speed-Ups führte.

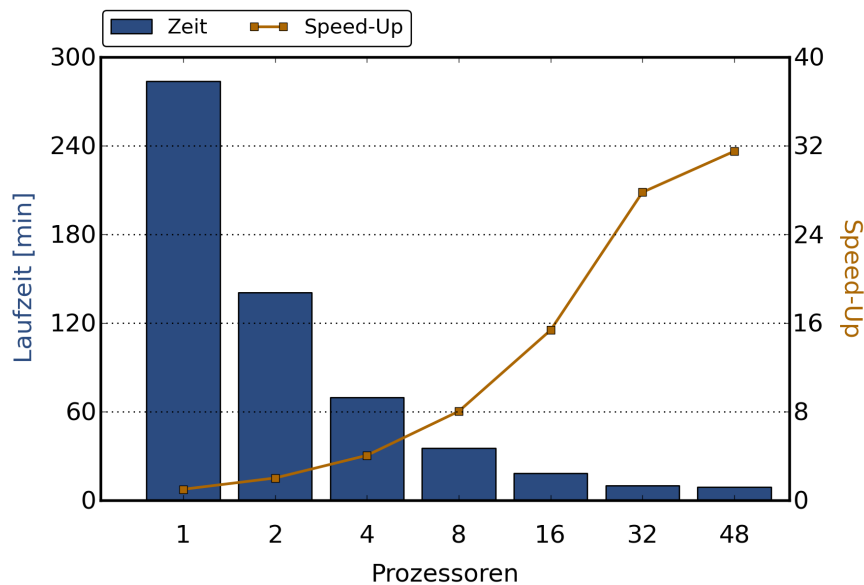


Abbildung 5.19: Ausführungszeit der Analyse eines Parameters bei der Verwendung einer unterschiedlichen Anzahl an Prozessoren und Darstellung des resultierenden Speed-Ups.

## 5.5 Diskussion

In der Ökosystemmodellierung ist die Bedeutung der Sensitivitätsanalyse allgemein bekannt (Saltelli and Annoni 2010; Saltelli et al. 2000; Cariboni et al. 2007; Saisana et al. 2005). Dies wird durch eine steigende Anzahl von Publikationen, die sich dem Thema der SA von komplexen, ökologischen Modellen widmen, bestätigt.

Verschiedene Methodiken zur Durchführung von SA sind weithin bekannt (Saltelli et al. 2000; Helton 1993). Obwohl die Morris-Methode bereits 1991 vorgestellt wurde (Morris 1991), gewann sie erst mit der Veröffentlichung von Saltelli's Arbeit (Saltelli et al. 2000), die einen Überblick über verschiedene SA-Ansätze gab, an Bedeutung. Die Morris-Methode ist gut für die Untersuchung von komplexen Modellen geeignet, da sie nur wenige Modellsimulationen zur Berechnung der Sensitivitätsmaße benötigt (Cariboni et al. 2007). In den letzten Jahren wurde die Morris-Methode häufig für die SA von ökologischen Modellen angewandt (Makler-Pick et al. 2011; Meszaros et al. 2009; Campolongo et al. 2007; Zador et al. 2006; Francos et al. 2003). Allerdings zeigten Saltelli and Annoni (2010), dass Screening-Methoden wie die Morris-Methode unzureichend für eine gründliche SA sind und deshalb nur mit Bedacht bzw. in Kombination mit komplexeren SA-Methoden eingesetzt werden sollten.

In Anlehnung an die Empfehlung von Saltelli and Annoni (2010) sowie den zahlreichen Anwendungsbeispielen durch DeJonge et al. (2012); Yang et al. (2012); Munoz-Carpena et al. (2007); Lu and Mohanty (2001), wurde in dieser Arbeit die Morris-Methode als Voruntersuchung zur Identifikation der relevanten Modellparameter eingesetzt. Die Erfahrung zahlreicher Modellierer hat in der Vergangenheit gezeigt, dass komplexe Modelle oft nur durch eine geringe Anzahl von Modellparametern wesentlich beeinflusst werden (Saltelli et al. 2000). Die Ergebnisse dieser Arbeit unterstützen diese Schlussfolgerung. Die SA für unterschiedliche Fruchtarten zeigte, dass – von den 108 untersuchten Parametern – zwischen 12 (Luzernegras) und 25 Parameter (Wintergerste, Wintertriticale) das Wachstum der oberirdischen Biomasse beeinflussten.

Die Anzahl der relevanten Modellparameter variierte für die untersuchten Fruchtarten. Für Luzerngras wurden nur 12 einflussreiche Parameter identifiziert, während die AGB von Wintergerste bzw. Wintertriticale von insgesamt 25 Parametern beeinflusst wurde. Die Variation in der Anzahl sensibler Parameter wird durch zwei wesentliche Faktoren verursacht: (1) das zu Grunde liegende individuelle Anbauszenario einer Frucht und (2) der für jede Fruchtart individuell konfigurierte Parameterwertebereich.

Obwohl die Morris-Methode mittels des Sensitivitätsmaßes  $\sigma$  die Identifikation von Interaktionen zwischen Parametern erlaubt, stellt das Ergebnis der Analyse ein qualitatives Parameter-Ranking dar, mit dessen Hilfe lediglich einflussreiche Modellparameter entdeckt werden können. Zuverlässige Informationen über den Grad der Sensitivität können aufgrund der geringen Anzahl an Modellsimulationen nicht abgeleitet werden (Saltelli and Annoni 2010). Aus diesem Grund wurde in dieser Arbeit die Extended FAST-Methode – zur Quantifizierung der Haupt- und Totaleffekte der Modellparameter – eingesetzt. Erst die Berechnung des Sensitivitätsmaßes der Extended FAST ermöglichte den Vergleich der Sensitivität verschiedener Parameter. Für Mais konnte so beispielsweise ermittelt werden, dass der Einfluss von *maxAssimRate* doppelt so hoch wie der von *specificLeafArea<sub>1</sub>* war. Erst durch die Berechnung der Haupt- und Totaleffekte mittels der Extended FAST war eine Ableitung dieser Informationen möglich.

Durch den Einsatz der Screening-Methode wurde der Rechenaufwand der nachfolgend durchgeführten Extended FAST erheblich reduziert. Aufgrund des hohen Rechenaufwands kann die Extended FAST nur bei der Analyse einer geringen Anzahl von Modellparametern eingesetzt werden (Confalonieri et al. 2010b; Saltelli et al. 2006). Eine Analyse der ausgewählten 108 Parameter wäre trotz des zur Verfügung stehenden Rechen-Clusters nicht realisierbar gewesen. Durch den Ausschluss von irrelevanten Parametern durch das Morris-Screening wurden maximal 26 Parameter mittels der Extended FAST untersucht.

Die SA für verschiedene Fruchtarten identifizierte verschiedene Parameter, die das Wachstum der oberirdischen Biomasse beeinflussten. Mit Ausnahme von Wintertriticale und Sudangras war *maxAssimRate* für alle anderen untersuchten Fruchtarten der einflussreichste Parameter. Bei Wintertriticale und Sudangras war der Parameter stark sensitiv, auch wenn andere Parameter einen größeren Einfluss besaßen. Der große Einfluss dieses Parameters war, aufgrund seiner Natur als multiplikativer Faktor, der mit der Assimilatmenge, die während der Photosynthese gebildet wird, multipliziert wird, vorherzusehen. Je höher die Assimilationsrate, desto größer die Assimilatmenge, die während des Pflanzenwachstums gebildet wird.

Weiterhin waren die Parameter der Erhaltungs- und Wachstumsatmung für alle Fruchtarten sensitiv mit Ausnahme von Luzerne- und Weidelgras. Der Prozess der Wachstums- und Erhaltungsatmung ist temperaturabhängig. Die Höhe der Assimilatmenge, die für die Pflanzenatmung benötigt wird, hängt von der aktuellen Pflanzenbiomasse ab und wird zusätzlich durch die Parameter *maintRespP1* und *maintRespP2* sowie *growthRespP1* und *growthRespP2* beeinflusst. *maintRespP1* und *growthRespP1* sind dabei Skalierungsfaktoren, wobei gilt: je größer die Skalierungsfaktoren, desto größer die für die Atmung erforderliche Biomasse. Die Parameter *maintRespP2* und *growthRespP2* spezifizieren einen Temperaturschwellwert, der bestimmt, ob die für die Atmung benötigte Assimilatmenge bei hohen Temperaturen erhöht bzw. bei niedrigen Temperaturen reduziert wird.

Die Temperatursummenparameter waren – ausgenommen von Luzerne- und Weidelgras – für alle Fruchtarten sensitiv. Die Temperatursumme hat großen Einfluss auf die Ontogenese der Pflanze, da sie die Wachstumsperiode einer Pflanze innerhalb eines Entwicklungsstadiums definiert. Eine

Erhöhung bzw. Reduktion der Temperatursumme hat großen Einfluss auf die Pflanzenentwicklung und demzufolge auch auf die AGB. Besonders hohen Einfluss besaßen die Temperatursummenparameter der frühen Entwicklungsstadien (*stageTempSum*<sub>1</sub> - *stageTempSum*<sub>3</sub>). Für Fruchtarten mit einem Aussaatdatum im Frühling bzw. Sommer war besonders der Temperatursummenparameter des ersten Stadiums (*stageTempSum*<sub>1</sub>) sensitiv.

Überraschenderweise wurden geringe Sensitivitäten für die *K<sub>c</sub>*-Faktoren ermittelt. Die *K<sub>c</sub>*-Faktoren regulieren den Wasserverbrauch der Pflanze (Transpiration). Dabei wird zunächst der potentielle Wasserbedarf der Pflanze berechnet und anschließend überprüft, ob dieser durch das im Boden zur Verfügung stehende Wasser gedeckt werden kann. Bei einem Wasserdefizit wird das Pflanzenwachstum aufgrund des Trockenstresses reduziert. Da der Einfluss der *K<sub>c</sub>*-Faktoren auf das Pflanzenwachstum gering war, lässt sich daraus schlussfolgern, dass trotz der Variation der Faktoren kein Wasserstress aufgrund von Wassermangel während der Simulation auftrat. Obwohl der Versuchsstandort Ascha genau aus diesem Grund für die Durchführung der SA ausgewählt wurde, war zu erwarten, dass die Manipulation der *K<sub>c</sub>*-Faktoren zu einer erhöhten Transpiration der Pflanze und einem daraus resultierenden Wasserstress führen würde. Es bleibt zu überprüfen, inwieweit die Sensitivität dieser Parameter bei der Verwendung von Simulationsdaten eines trockeneren Standorts sich ändern würde.

Weiterhin unerwartet war die geringe Sensitivität des Vernalisationsparameters (*vernReq*<sub>2</sub>) für die Wintergetreidearten Winterweizen, Wintertriticale und Wintergerste. Der Parameter spezifiziert einen Zeitraum, den die Pflanze zur Vernalisation benötigt. Wird dieser Schwellwert nicht erreicht, so wird die Pflanzenentwicklung signifikant verzögert, was sich wiederum auf die Entwicklung der AGB auswirkt. Während der Parameter für Winterraps einen hohen Einfluss besaß, wurde das Wachstum der AGB von Winterweizen, Wintertriticale und Wintergerste nur gering durch *vernReq*<sub>2</sub> beeinflusst.

Für viele Fruchtarten waren die Parameter *daylengthReq*<sub>2</sub> - *daylengthReq*<sub>4</sub> leicht sensitiv. Die Parameter zur Spezifikation der Tageslängenanforderung können einen reduzierenden Einfluss auf die Berechnung der aktuellen Temperatursumme haben. Normalerweise wechselt die Pflanze in das nächste Entwicklungsstadium sobald ein Schwellwert – spezifiziert durch die Temperatursummenparameter – erreicht wird. Kann die Forderung nach der erforderlichen Tageslänge nicht erfüllt werden, so wird der Tagestemperatursummenwert reduziert. Daraus resultierend wird die Pflanzenentwicklung verzögert, wobei die Pflanze länger im aktuellen Entwicklungsstadium verbleibt.

Die SA für verschiedene Outputs wurde exemplarisch am Beispiel von Winterweizen durchgeführt. Wie jedoch die zuerst durchgeführte SA zeigte, besitzen unterschiedliche Fruchtarten unterschiedliche Parametersensitivitäten. Es ist davon auszugehen, dass die Ergebnisse der SA einer anderen Fruchtart sich von denen, die am Beispiel des Winterweizen abgeleitet wurden, unterscheiden.

Bei der Gegenüberstellung der Parametersensitivitäten verschiedener Outputs wurde festgestellt, dass die sensitiven Parameter des LAI keine Ähnlichkeiten mit den Parametersensitivitäten anderer Outputs besaßen. Dieses Ergebnis war unerwartet, da die Berechnung des LAI abhängig von der Blattbiomasse ist und dadurch eine Abhängigkeit der beiden Outputs erwartet wurde. Eine detaillierte Untersuchung der Parametersensitivitäten beider Outputs ergab, dass beim LAI für *specificLeafArea*<sub>3</sub> eine hohe Sensitivität ermittelt wurde, während der Parameter für die Blattbiomasse (Leaf) nicht sensitiv war. Dies führte zu der niedrigen Übereinstimmung der Parametersen-

sitivitäten von LAI und Leaf. Ohne Berücksichtigung des Parameters *specificLeafArea*<sub>3</sub> wäre  $R^2$  von  $\text{LAI} \times \text{Leaf}$  gleich 0.95, dass dem erwarteten Ergebnis entsprochen hätte.

Die Untersuchung der Zeitabhängigkeit verdeutlichte, dass die Parametersensitivität starken saisonalen Schwankungen unterliegt. Aus diesem Grund wurden sowohl bei der SA für verschiedene Fruchtarten als auch bei der SA für verschiedene Outputs gemittelte Werte verwendet, um den saisonalen Effekt auf die Parametersensitivität zu reduzieren.

Weiterhin zeigte diese Untersuchung, dass viele pflanzenspezifische Parameter erst ab dem zweiten Entwicklungsstadium (Auflaufen der Pflanze) mit dem Einsetzen photosynthetischer Aktivität sensitiv waren. Obwohl viele entwicklungsstadien-abhängige Parameter nur für einen kurzen Zeitabschnitt in der Pflanzenentwicklung verwendet werden, konnte ein Einfluss der Parameter bis in die späte Pflanzenentwicklung nachgewiesen werden (z.B. *specificLeafArea*<sub>1</sub> beim Wurzelwachstum, Abbildung 5.12). Die Analyse verschiedener Boden-Outputs des Modells verdeutlichte, dass viele pflanzenspezifische Parameter auch nach der Ernte noch einen signifikanten Einfluss haben.

In den SA dieser Arbeit wurden ausschließlich die Daten eines Standortes für die Simulationen verwendet. Das in den SA verwendete Simulationsszenario basierte auf Boden- und Wetterdaten des EVA-Versuchsstandorts Ascha. Der Einfluss der Bodeneigenschaften auf die Parametersensitivität sowohl bei der Analyse verschiedener Fruchtarten als auch bei der Untersuchung unterschiedlicher Modelloutputs wurde nicht berücksichtigt. Eine SA, bei der die Simulationsdaten auf den Informationen eines anderen Standortes basierten, würde wahrscheinlich zu leicht unterschiedlichen Ergebnissen der Parametersensitivitäten führen. Obwohl die Ergebnisse sowohl der AGB bei der Untersuchung der Sensitivität verschiedener Fruchtarten als die der anderen Outputs – zur Vermeidung von saisonalen Effekten – gemittelt wurden, würde die Parametersensitivität bei der Verwendung eines anderen Simulationsstandorts mit unterschiedlichen klimatischen Eigenschaften variieren. Eine weitere Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse des MONICA-Modells wäre zur Quantifizierung der Höhe der Unsicherheit, die durch veränderte Klima- bzw. Bodeneigenschaften verursacht wird, erforderlich.



## 6 Parametrisierung von MONICA

Das MONICA-Modell wurde in EVA 2 zur Quantifizierung von Sickerwasser und Nitrataustrag im Rahmen der Abschätzung der Folgewirkungen des Energiepflanzenanbaus eingesetzt. Der Einsatz im Projekt erforderte die Kalibrierung des Modells für untersuchte Marktfrüchte und Energiepflanzen der EVA 2-Fruchtfolgen. Zu Beginn von EVA 2 (2009) war MONICA bereits für verschiedene Fruchtarten kalibriert (Tabelle 6.1). Allerdings erfolgte in den Fruchtfolgeversuchen der Anbau von Fruchtarten, für die zu dieser Zeit keine Parametersätze in MONICA vorhanden waren. Die Simulation gesamter Fruchtfolgen erforderte die Parametrisierung des Modells für alle angebauten Fruchtarten einer Fruchtfolge.

Ein zentrales Ziel innerhalb des Projekts war die Analyse der Standardfruchtfolgen (Tabelle 4.2), da für diese Fruchtfolgen eine standortübergreifende Auswertung geplant war. Die Untersuchung der Regional-Fruchtfolgen war von sekundärer Bedeutung. Aus diesem Grund erfolgte zunächst eine Parametrisierung des Modells für Fruchtarten der Standardfruchtfolgen (Tabelle 6.1). Das Ziel der Parametrisierung war eine Erweiterung des Fruchtartenspektrums von MONICA um fehlende Fruchtarten unter Verwendung der Versuchsdaten der EVA-Projekte (Standard- und Regionalfruchtfolgen). Weiterhin hatte die Parametrisierung das Ziel, bestehende Parametersätze wie beispielsweise die von Mais und Klee gras an die Besonderheiten des Anbaus als Energiepflanzen anzupassen.

In dieser Arbeit erfolgte eine Parameter-Optimierung des Modells für die in Tabelle 6.1 aufgeführten Fruchtarten. Die in MONICA bereits vorhandenen Parametersätze für Klee gras und Mais wurden für die Auswertung der EVA-Projekte optimiert. Die Kalibrierung erfolgte unter Verwendung der Messdaten der EVA-Projekte.

Tabelle 6.1: Fruchtartenüberblick: (1) über die in MONICA integrierten Fruchtarten zu Beginn des EVA 2-Projektes (Stand 2009), (2) über die fehlenden Fruchtarten zur Auswertung der Standardfruchtfolgen von EVA und EVA 2 und (3) über Fruchtarten, für die mit Hilfe der Parameter-Optimierung ein neuer Parametersatz im MONICA-Modell erstellt wurde.

(1)	<b>Kalibrierte</b>	Winterweizen	Wintergerste	Winterroggen	Sommergerste
	<b>Fruchtarten</b>	Körnermais	Silomais	Winterraps	Klee gras
	(Stand 2009)	Zuckerrübe	Senf	Phacelia	
(2)	<b>Unkalibrierte</b>	Luzerne-Gras	Luzerne-Klee gras	Weidelgras	Ölrettich
	<b>Fruchtarten</b>	Sudangras	Wintertriticale	Sommerroggen	Zuckerhirse
	(Stand 2009)	Hafer			
(3)	<b>Analysierte</b>	Klee gras	Luzerne-Gras	Luzerne-Klee gras	Weidelgras
	<b>Fruchtarten der</b>	Silomais	Sudangras	Zuckerhirse	Wintertriticale
	<b>Optimierung</b>	Hafer	Sommerroggen		

## 6.1 Versuchsaufbau der Optimierung

Die Entwicklung einer geeigneten Optimierungsstrategie erforderte zunächst die Selektion der zu optimierenden Parameter. Die Auswahl der Parameter basierte auf den Ergebnissen der SA des MONICA-Modells für verschiedene Outputs (Kapitel 5.3). Die Parametrisierung des Modells erforderte weiterhin die Spezifikation einer Optimierungsconfiguration. Diese beinhaltet die Beschreibung der zu optimierenden Zielfunktion, die Definition der Datensätze zur Verwendung bei der Modellkalibrierung und -validierung sowie die Spezifikation des Parameter-Wertebereichs der Optimierung.

### 6.1.1 Spezifikation der Zielfunktion

Die Optimierung erfolgte unter Auswertung des nMAE, einem relativen Maß zur Beschreibung der mittleren, absoluten Abweichungen zwischen Modell- und Messwerten. Die unterschiedlichen Einheiten der betrachteten Outputs erforderten die Verwendung eines relativen Maßes bei der Optimierung.

Zur Spezifikation der Zielfunktion des Optimierungsproblems erfolgte die Durchführung verschiedener Tests. Im Rahmen dieser Tests wurde überprüft, ob eine Optimierung unter Verwendung einer Zielfunktion, d.h. anhand der Minimierung des nMAEs eines Outputs, bzw. eine multikriterielle Optimierung mit Verwendung mehrerer Zielfunktionen, d.h. der Minimierung des nMAEs mehrerer Outputs, zu einem optimalen Parametersatz führt. Die Ziele einer multikriteriellen Optimierung können allerdings widersprüchlich sein, so dass eine Optimierung des einen Ziels zu einer Verschlechterung des anderen Ziels führen kann. Das Optimum einer multikriteriellen Optimierung wird als Pareto-Optimum bezeichnet (Ehrgott 2005). Ein Pareto-Optimum stellt eine Lösung dar, bei der keine Verbesserung eines Optimierungskriteriums ohne Verschlechterung eines anderen erzielt werden kann.

Die Ergebnisse der Untersuchungen werden am Beispiel der Modelloutputs *Moist<sub>30</sub>* und *Nmin<sub>30</sub>* bei der Optimierung des Mais-Parametersatzes vorgestellt. Die Tests des Wassergehalts umfassten zum Einen die Optimierung unter ausschließlicher Verwendung von Wassergehaltsmessdaten (*Singulärer Output*), zum Anderen die Optimierung unter Berücksichtigung des Wassergehalts sowie des Mais-Ertrags (*Multiple Outputs*). Die Optimierung der für  $N_{min}$  sensitiven Parameter erfolgte zunächst unter alleiniger Berücksichtigung von *Nmin<sub>30</sub>*-Messwerten (*Singulärer Output*). Die zweite Testkonfiguration für  $N_{min}$  beinhaltete die Optimierung unter Verwendung der Messdaten der Outputs *Nmin<sub>30</sub>*, *Yield* und *NConc* (*Multiple Outputs*).

Abbildung 6.1 enthält die Ergebnisse der Tests für *Moist<sub>30</sub>* und *Nmin<sub>30</sub>*. Original bezeichnet den unveränderten Parametersatz, der die Ausgangsbasis der Optimierung bildete. Bei der Optimierung des Wassergehalts mit einem Output wurden ausschließlich *Moist<sub>30</sub>*-Messwerte verwendet. Die Konfiguration mit mehreren Outputs für *Moist* umfasste die Verwendung von Messwerten zum Wassergehalt und Mais-Ertrag. Die Optimierung von  $N_{min}$  mit nur einem Output erfolgte ausschließlich unter Berücksichtigung von *Nmin<sub>30</sub>*, während bei der Konfiguration mit mehreren Outputs zusätzlich *Yield* und *NConc* betrachtet wurden. Die größte Reduktion des nMAEs für *Moist<sub>30</sub>* wurde bei der Verwendung nur eines Outputs erzielt. Allerdings zeigte eine Analyse der optimierten Modellparameter, dass deren Wertebelegung aus ökologischer Sicht unplausibel war. Die Optimierungsconfiguration, die zusätzlichen den Ertrag von Mais berücksichtigte, war trotz



des höheren nMAEs zu empfehlen, da die Parameterbelegungen in einem aus pflanzenbaulicher Sicht sinnvollem Bereich lagen. Die Tests für  $Nmin_{30}$  ergaben, dass der Parametersatz der Optimierung unter Berücksichtigung mehrerer Outputs die geringste Abweichung zwischen Modell- und Messwerten bezogen auf den nMAE erzielte.

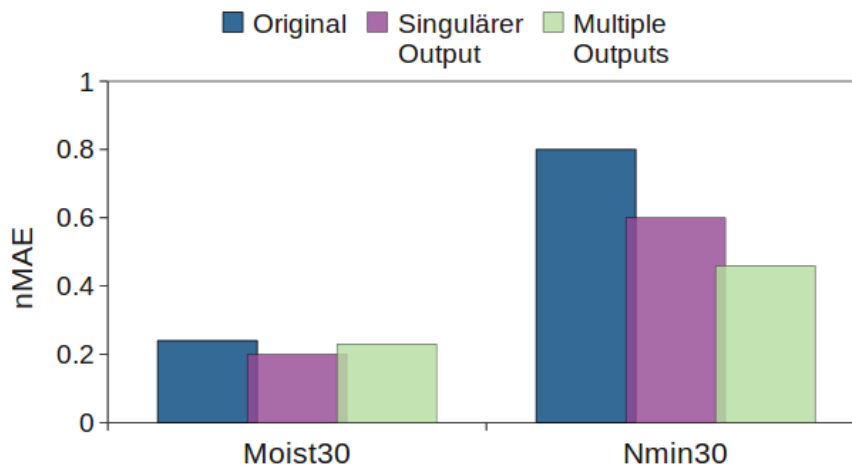


Abbildung 6.1: Darstellung des Optimierungstests bei der Optimierung der sensitiven Parameter von  $Moist_{30}$  und  $Nmin_{30}$  zur Identifikation der zu verwendenden Outputs am Beispiel von Mais.

Es erfolgte eine Unterteilung der Parameteroptimierung in vier Phasen, in denen die Modellparameter bezogen auf Ertrag, N-Konzentration in der Biomasse, Bodenwassergehalt,  $N_{min}$  und Pflanzenhöhe optimiert wurden. Mit Ausnahme der Optimierung der Pflanzenhöhe erfolgte die Spezifikation von multikriteriellen Zielfunktionen, bei denen die Abweichungen zwischen Modellsimulation und Messwerten von mehreren Outputs minimiert wurden. Die verwendeten Zielfunktionen wurden mit gleicher Gewichtung bei der Optimierung berücksichtigt. Die Durchführung einer multikriteriellen Optimierung war erforderlich, um einerseits eine Überspezialisierung der Parameter an einem Modelloutput zu unterbinden. Andererseits zeigte bereits die SA von MONICA den Einfluss von verschiedenen Modellparametern auf mehrere Outputs. Bei der Optimierung der Pflanzenhöhe erfolgte die Optimierung ausschließlich unter Berücksichtigung des nMAEs von *Height*, da – aufgrund der einfachen Implementierung des Algorithmus zur Berechnung der Pflanzenhöhe – keine Abhängigkeiten der sensitiven Parameter von *Height* zu anderen Modellprozessen bestand. Die vier spezifizierten Optimierungsexperimente, die für jede untersuchte Fruchtart durchgeführt wurden, sind in Tabelle 6.2 aufgeführt. Die Spezifikation eines Optimierungsexperiments umfasst die Angabe des Optimierungskriteriums, der zu optimierenden Modellparameter und Modelloutputs. Es erfolgte eine Optimierung für die in Tabelle 4.5 aufgeführten Outputs.

### 6.1.2 Parameter-Wertebereich der Optimierung

Die Spezifikation des Wertebereichs der Parameter ist – analog zur Sensitivitätsanalyse – ein wichtiger Schritt der Optimierung. In Abbildung 6.2 ist in Abhängigkeit des Wertebereichs der Modellparameter *cropHeightP1* und *cropHeightP2* von Sudangras die zu minimierende Zielfunktion von *Height* dargestellt. Helle Flächen markieren dabei günstige Parameterwerte, bei denen

Tabelle 6.2: Beschreibung der vier definierten Optimierungsexperimente zur Parametrisierung des MONICA-Modells.

	<b>OPT<sub>1</sub></b>	<b>OPT<sub>2</sub></b>	<b>OPT<sub>3</sub></b>	<b>OPT<sub>4</sub></b>
<b>Optimierungskriterium</b>	nMAE	nMAE	nMAE	nMAE
<b>Modellparameter</b>	maxAssimRate nConcPN stageTempSum <sub>1</sub> stageTempSum <sub>2</sub> stageTempSum <sub>3</sub> stageTempSum <sub>4</sub> stageTempSum <sub>5</sub> stageTempSum <sub>6</sub>	stageKcFactor <sub>1</sub> stageKcFactor <sub>2</sub> stageKcFactor <sub>3</sub> stageKcFactor <sub>4</sub> stageKcFactor <sub>5</sub>	maxAssimRate minAvailableN nConcB0 nConcPN	cropHeightP1 cropHeightP2
<b>Outputs</b>	Yield AGB	Yield Moist <sub>30</sub> Moist <sub>60</sub> Moist <sub>90</sub>	Yield NConc Nmin <sub>30</sub> Nmin <sub>60</sub> Nmin <sub>90</sub>	Height

der zu optimierende Modellfehler (nMAE) klein ist. Dunkle Flächen weisen auf ungünstige Parameterbelegungen hin. Der Erfolg der Optimierung hängt wesentlich vom spezifizierten Untersuchungsraum ab. Die Wahl eines zu großen Wertebereichs erhöht das Risiko, die Suche beim Erreichen eines lokalen Optimums zu beenden. Die Wahl eines zu kleinen Wertebereichs birgt die Gefahr, den Bereich des globalen Optimums auszuschließen.

In der prozessorientierten Ökosystemmodellierung sind pflanzenspezifische Parameter oft physiologisch ableitbar. Bei der Spezifikation des Wertebereichs dieser Parameter ist zu berücksichtigen, dass die Parameterbelegungen in einem ökologisch sinnvollen Bereich liegen. Die Wahl eines zu großen Bereichs könnte zur Identifizierung von Parameter-Belegungen führen, die den nMAE minimieren, jedoch aus ökologischer Sicht unplausibel sind.

Für die Kalibrierung des MONICA-Modells wurden die in den SA für verschiedene Fruchtarten spezifizierten Wertebereiche verwendet. Bei bereits parametrisierten Fruchtarten wie Mais oder Klee gras wurden als Startwerte der Optimierung die vorhandenen Parameter-Werte der Fruchtarten genutzt. Die Startwerte der neu zu parametrisierenden Fruchtarten basierten auf Parameter-Werten von Fruchtarten mit physiologisch ähnlichen Eigenschaften. Die Initialisierung der Optimierungen von Luzernegras und Luzerne-Klee gras erfolgte mit Parameter-Werten von Klee gras. Die Parameter von Silomais wurden für die Initialisierung der Optimierungen von Sudangras und Zuckerhirse verwendet.

### 6.1.3 Unterteilung der Kalibrierungs- und Validierungsdatensätze

Für den Vergleich der Simulationsergebnisse mit den EVA-Daten lagen für jede untersuchte Fruchtart verschiedene Messdatensätze – aufgrund des mehrfachen Anbaus einer Fruchtart in verschiedenen Fruchtfolgen, an mehreren Standorten sowie in verschiedenen Versuchsjahren – vor. Dies ermöglichte eine Unterteilung der vorhandenen Messdaten in Kalibrierungs- und Validierungsdatensätze. Die Parameter-Optimierung erfolgte ausschließlich unter Verwendung der Messdaten

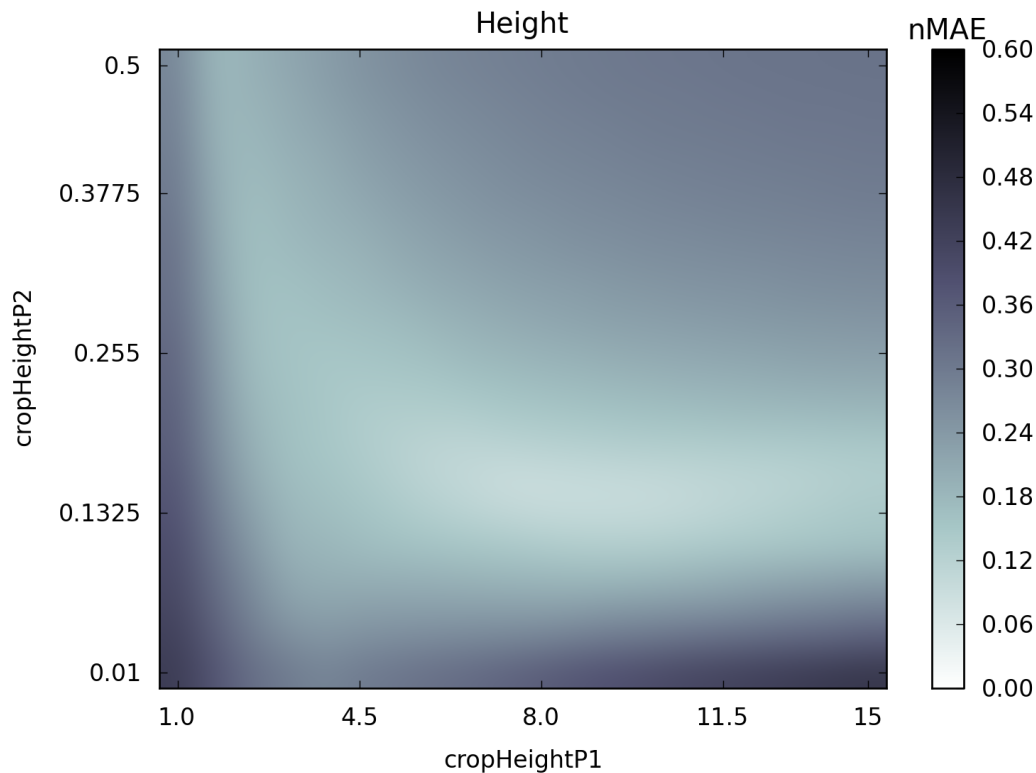


Abbildung 6.2: nMAE der Pflanzenhöhe von Sudangras in Abhängigkeit der Parameter *cropHeightP1* und *cropHeightP2*.

der Kalibrierungsdatensätze. Die Überprüfung der Qualität der Optimierung sowie der Übertragbarkeit der entwickelten Modellparametersätze für die Berechnung unabhängiger Simulationen erfolgte auf Basis der Validierungsdaten.

Vor der Unterteilung der Daten in Kalibrierungs- und Validierungsdaten erfolgte die Durchführung verschiedener Tests, in denen die Anzahl der Standorte, deren Messdaten in der Kalibrierung verwendet wurden, variiert wurde. Es erfolgte eine Analyse der Performanz des originalen Parametersatzes im Vergleich zu den optimierten Parametersätzen, die unter Verwendung der Daten (i) eines Standortes (Ascha), (ii) von drei Standorten (Ascha, Dornburg, Trossin) und (iii) von sieben Standorten (Ascha, Dornburg, Ettlingen, Gülzow, Güterfelde, Trossin und Werlte) entwickelt wurden.

Abbildung 6.3 enthält eine Darstellung des mittleren nMAE der entwickelten Parametersätze für Mais für die unterschiedlichen Optimierungskonfigurationen. Original bezeichnet den unveränderten Parametersatz, der die Ausgangsbasis der Optimierung bildete. Folgende Standort-Konfigurationen wurden getestet: 1 Standort (Ascha), 3 Standorte (Ascha, Dornburg, Trossin), 7 Standorte (Ascha, Dornburg, Ettlingen, Gülzow, Güterfelde, Trossin, Werlte). Es erfolgte ein Vergleich mit dem originalen, nicht-optimierten Parametersatz für ausgewählte Datensätze aller Versuchsstandorte, die bei keiner der getesteten Konfigurationen zur Kalibrierung verwendet wurden. Es zeigte sich, dass die Verwendung der Daten nur eines Standortes die schlechtesten Ergebnisse bei der Validierung erzielte. Eine Analyse ergab, dass eine Überspezialisierung des Para-

Parametersatz für den Kalibrierungsstandort erfolgte. Der so entwickelte Parametersatz war nicht auf andere Standorte übertragbar. Die Parametersätze, die unter Verwendung der Messdaten von sieben Standorten entwickelt wurden, führten zum besten Optimierungsergebnis mit den geringsten Abweichungen von Modell und Messwerten.

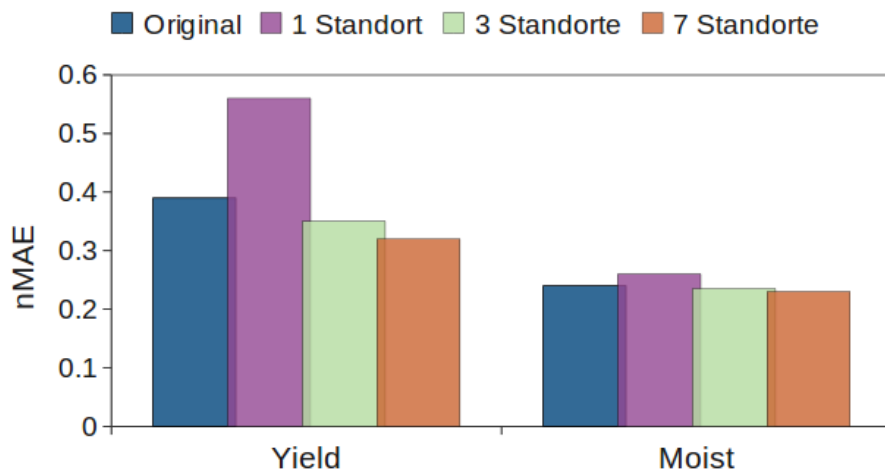


Abbildung 6.3: Darstellung des Optimierungsergebnisses für Ertrag (Yield) und Bodenwassergehalt in 0-90 cm (Moist) für Mais zur Identifikation der optimalen Anzahl an Standorten, deren Daten in der Optimierung eingesetzt werden.

Auf Basis der Ergebnisse der durchgeführten Tests erfolgte die Optimierung anhand der Messdaten von sieben Versuchsstandorten. Allerdings wurden ausschließlich Daten der Standardfruchtfolgen des ersten EVA-Projekts in der Modellkalibrierung verwendet. Zur Validierung standen somit die vollständigen Datensätze aller Versuchsstandorte von EVA 2 sowie die Daten der Regionalfruchtfolgen von EVA zur Verfügung.

## 6.2 Parameter-Optimierung

Die Optimierung wurde mit Hilfe der Optimierungssoftware HOPSPACK (Kapitel 4.3) für jede Fruchtart individuell unter Verwendung der spezifizierten Optimierungsexperimente (Tabelle 6.2) auf dem ZALF Rechner-Cluster durchgeführt. Zur Bewertung der optimierten Parametersätze erfolgte ein Vergleich der Simulationen der EVA-Fruchtfolgen zwischen den Parametersätzen vor (*'Original'*) und nach der Optimierung (*'Optimiert'*). Beim Vergleich von neu zu parametrisierenden Fruchtarten wurden die Parameter von physiologisch ähnlichen Fruchtarten als Initial- und Vergleichswert verwendet.

In Abbildung 6.4 ist die Simulationsgüte sowohl für die Kalibrierungs- als auch Validierungsdatensätze dargestellt. Es erfolgte ein Vergleich des originalen und des optimierten Parametersatzes exemplarisch für die Fruchtarten Zuckerhirse und Klee gras. Generell zeigte sich, dass eine Reduzierung des nMAE für Simulationen unter Verwendung des optimierten Parametersatzes erreicht wurde. Die Auswertung der Modellperformanz der Validierungsdaten weist eine Übertragbarkeit der entwickelten Parametersätze auf unabhängige Simulationen nach.

In Abbildung 6.5 ist für jede untersuchte Fruchtart der resultierende nMAE bei Verwendung der optimierten Parametersätze für die Simulation der Validierungsdatensätze dargestellt. Die Boxplots stellen den über alle untersuchten Fruchtarten aggregierten nMAE dar. Neben den Boxplots

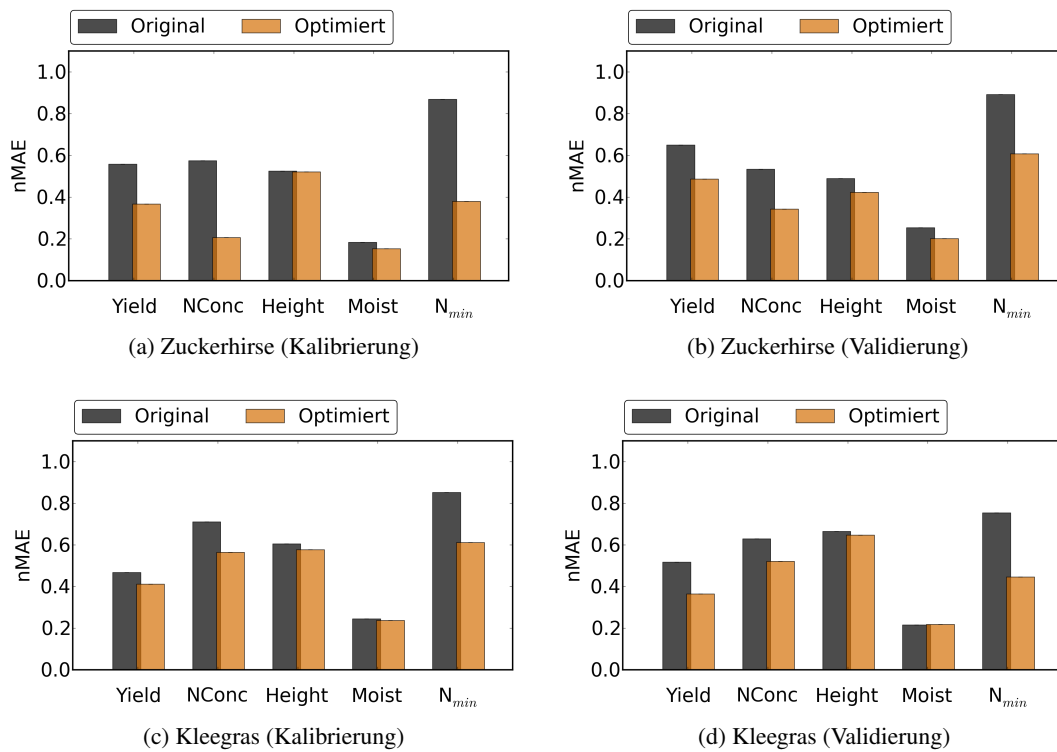


Abbildung 6.4: Vergleich der Performanz der optimierten Parametersätze der Kalibrierungs- und Validierungsdaten von Zuckerhirse und Klee gras.

ist der fruchtartenspezifische, individuelle nMAE abgebildet. Die geringsten Abweichungen zwischen Mess- und Modellwerten wurden von MONICA bei der Simulation des Bodenwassergehalts (Moist) erzielt. In Abhängigkeit von der Fruchtart lag der nMAE zwischen 0.18 (Luzerne-Klee gras) und 0.3 (Zuckerhirse). Gute Übereinstimmungen erzielte MONICA bei der Simulation von Yield und NConc. Ausnahme bei NConc bildeten Luzerne-Klee gras und Luzerne-Gras mit einem nMAE von 0.65.

Der nMAE bei Simulation der Pflanzenhöhe wies eine hohe Variation für die untersuchten Fruchtarten auf. MONICA bildete die Höhe für die Fruchtarten Luzerne-Klee gras, Hafer, Wintertriticale, Sudangras und Mais gut ab ( $nMAE \leq 0.3$ ). Größere Abweichungen im Vergleich zu den Messdaten wiesen die Simulationen von Zuckerhirse, Sommerroggen und Klee gras auf ( $0.4 \leq nMAE \leq 0.5$ ). Die Simulationen des N<sub>min</sub> zeigten große Abweichungen auf. Der mittlere nMAE von N<sub>min</sub> aller Fruchtarten betrug 0.48. Am besten wurde der N<sub>min</sub>-Gehalt für Hafer, Zuckerhirse, Klee gras, Sommerroggen und Mais abgebildet. Für Luzerne-Klee gras ( $nMAE=0.64$ ) und Luzerne-Gras ( $nMAE=0.63$ ) wurden die größten Abweichungen von N<sub>min</sub> ermittelt.

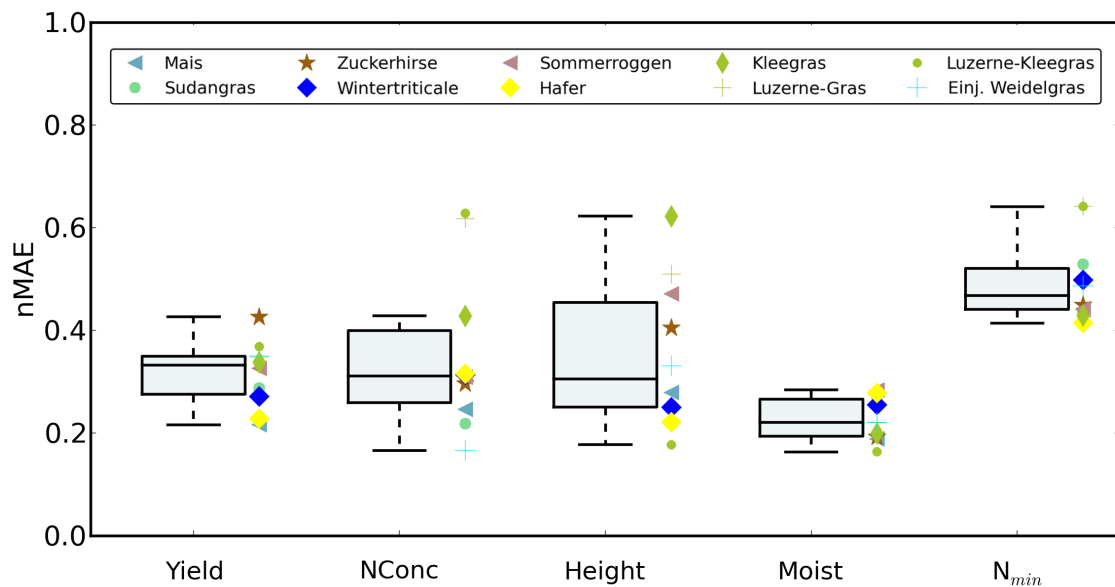


Abbildung 6.5: Auswertung des nMAE über alle untersuchten Fruchtarten. Darstellung des mittleren, individuellen nMAEs der untersuchten Fruchtarten neben den Boxplots.

### 6.3 Simulation der EVA-Fruchtfolgen

Die Parametrisierung des MONICA-Modells ermöglichte die Simulation der Fruchtfolgen der EVA-Projekte zur Bewertung der abiotischen Folgewirkungen des Energiepflanzenanbaus. Zur Evaluierung der entwickelten Parametersätze erfolgte ein Vergleich zwischen Modell- und Messwerten mittels Simulationen der Standardfruchtfolgen von EVA und EVA 2. In Abbildung 6.6 sind die Ergebnisse der Simulation sowie die erhobenen Messwerte einer Fruchtfolge (FF02, EVA) aus Werlte beispielhaft dargestellt.

Der Vergleich zwischen Modell- und Messwerten erfolgte für die Outputs: *Yield*, *NConc*, *Height*, *Moist* und *N<sub>min</sub>*, die beiden letzten jeweils in 0 – 90cm Bodentiefe, für alle EVA-Versuchsstandorte. Abbildung 6.7 enthält die Darstellung des nMAEs der untersuchten Standardfruchtfolgen exemplarisch für die Outputs *Yield*, *NConc* und *N<sub>min</sub>*. Neben den Boxplots ist der gemittelte nMAE der Versuchsstandorte abgebildet.

Zusätzlich zur Bestimmung des nMAEs erfolgte die Berechnung des MAE, MBE, nMBE und EF als erweiterte Analyse der Modellperformanz. In der Agrarökosystemmodellierung werden Simulationen als akzeptabel eingestuft, wenn der *nMAE* < 0.2 bzw. *EF* ≥ 0 ist (Nendel et al. 2011a). In Tabelle 6.3 ist der Median der berechneten Gütemaße nach Durchführung von Simulationen der Standardfruchtfolgen aller EVA-Standorte dargestellt. An dieser Stelle erfolgte die Verwendung des Medians anstelle des Mittelwerts, da letzterer wesentlich durch Ausreißer der berechneten Gütemaße verschlechtert werden kann.

Der nMAE des Ertrags einzelner Versuchsstandorte variierte zwischen 0.14 (Gülzow, FF05) und 0.41 (Güterfelde, FF04). Bei Berücksichtigung des aggregierten nMAEs aller Versuchsstandorte wurde die höchste Übereinstimmung mit den Messdaten bei der Simulation von FF03 erzielt. Die Simulationen wiesen eine leichte Unterschätzung (MBE < 0) des Ertrags in den Fruchtfolgen FF01 bis FF04 auf. Lediglich in FF05 neigte das Modell zur einer Überschätzung des Ertrags.

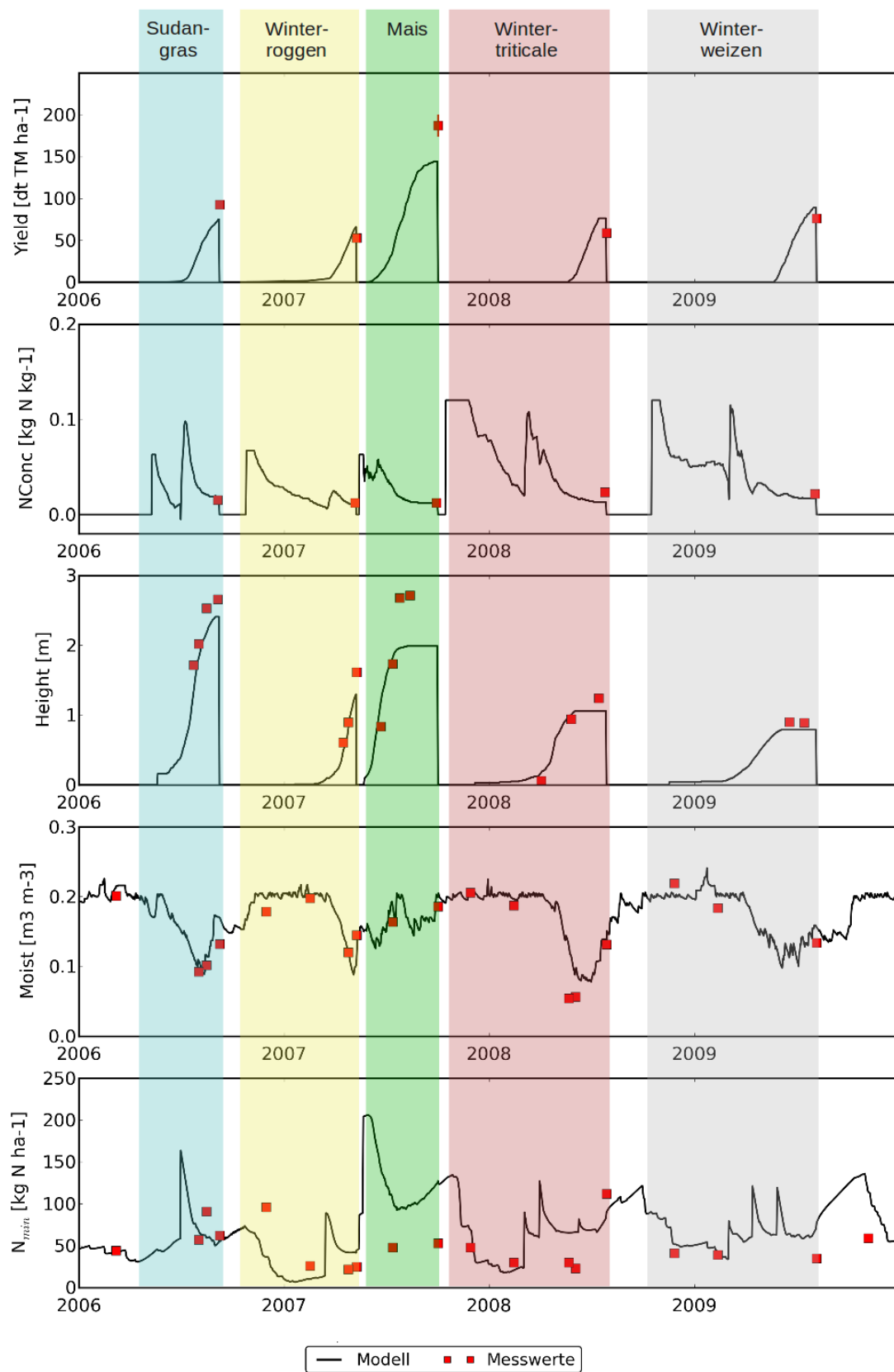


Abbildung 6.6: Beispielsimulation der Fruchtfolge FF02 in Werlte (1. Wiederholung, EVA).

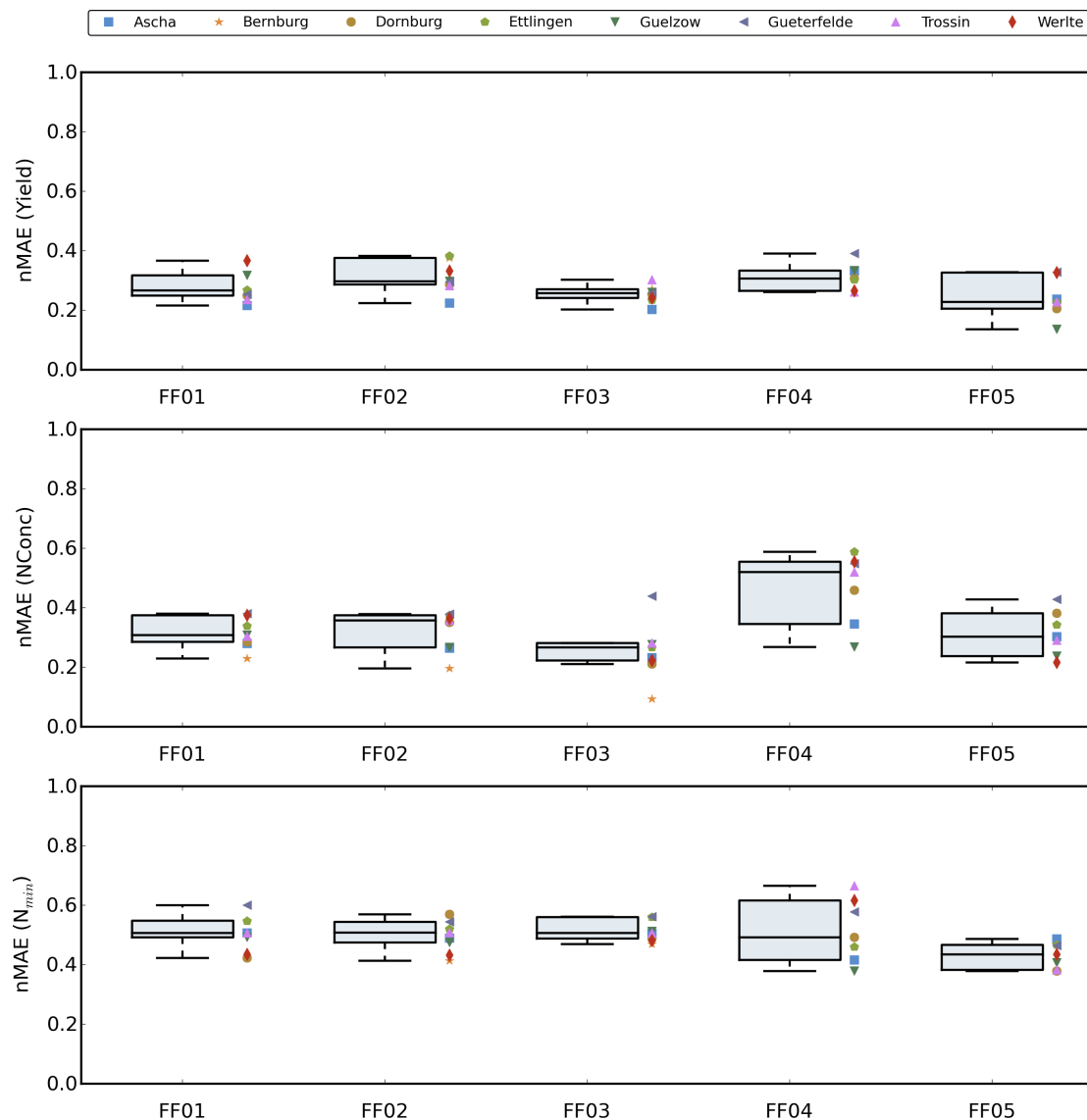


Abbildung 6.7: nMAE der simulierten Fruchtfolgen für die Outputs *Yield*, *NConc* und  $N_{min}$ . Darstellung des mittleren, individuellen nMAE's der EVA-Versuchsstandorte.

Für jede Fruchtfolge war der Wert von EF größer Null. Dies belegt, dass MONICA mittels der integrierten Parametersätze fähig ist, die Ertragsdynamik beim Anbau verschiedener Fruchtarten in einer Fruchtfolge abzubilden.

Im Vergleich zum Ertrag wiesen die Simulationsergebnisse von *NConc* größere Abweichungen zu den Messwerten auf. Der geringste nMAE wurde für Fruchtfolge FF03 ermittelt. Mit Ausnahme der Simulationen von Güterfelde (nMAE=0.42), lag der nMAE der Simulationen anderer Versuchsstandorte unterhalb von 0.3. Ebenfalls zufriedenstellende Simulationsergebnisse wurden für FF01, FF02 und FF05 erzielt. Die größten Probleme zeigte das Modell bei der Simulation von FF04. Hier lag der nMAE mit Ausnahme von Guelzow (nMAE=0.24) und Ascha (nMAE=0.37) oberhalb von 0.4. Eine Analyse der Simulationen von FF04 zeigte, dass die größten Abweichungen bei der Simulation der mehrjährigen Ackerfuttermischungen (Klee gras, Luzerne-Gras oder Luzerne-Klee gras) auftraten. Der  $MBE < 0$  bei *NConc* zeichnete eine systematische Unterschät-



Tabelle 6.3: Statistische Gütemaße zur Validierung des MONICA Modells anhand der Simulationen der Standardfruchtfolgen der EVA-Projekte. Median der Gütemaße über die Simulationen aller Versuchsstandorte.

Output	Fruchtfolge	MAE	nMAE	MBE	nMBE	EF
Yield	FF01	2805.39	0.265	-880.09	-0.080	0.69
Yield	FF02	2562.56	0.288	-617.33	-0.062	0.42
Yield	FF03	2107.94	0.253	-37.74	-0.004	0.75
Yield	FF04	1370.61	0.311	-72.61	-0.017	0.26
Yield	FF05	1791.72	0.235	899.88	0.154	0.31
NConc	FF01	0.005	0.286	-0.003	-0.20	-1.52
NConc	FF02	0.005	0.306	-0.004	-0.25	-2.72
NConc	FF03	0.004	0.223	-0.002	-0.10	-0.08
NConc	FF04	0.013	0.486	-0.008	-0.34	-6.88
NConc	FF05	0.006	0.266	-0.005	-0.25	0.16
Height	FF01	0.31	0.28	-0.08	-0.070	0.64
Height	FF02	0.31	0.23	-0.09	-0.060	0.76
Height	FF03	0.39	0.28	-0.11	-0.090	0.70
Height	FF04	0.21	0.36	0.01	0.027	-0.23
Height	FF05	0.24	0.33	0.00	0.002	0.43
Moist	FF01	0.042	0.204	0.035	0.21	0.21
Moist	FF02	0.041	0.218	0.037	0.22	0.25
Moist	FF03	0.040	0.215	0.035	0.23	0.14
Moist	FF04	0.043	0.222	0.033	0.26	-0.08
Moist	FF05	0.047	0.213	0.039	0.26	0.14
N <sub>min</sub>	FF01	13.77	0.567	-2.69	-0.11	-0.02
N <sub>min</sub>	FF02	14.81	0.582	-2.40	-0.11	-0.02
N <sub>min</sub>	FF03	14.86	0.581	-3.42	-0.14	-0.06
N <sub>min</sub>	FF04	11.08	0.519	3.62	0.20	-0.20
N <sub>min</sub>	FF05	12.79	0.475	-2.14	-0.07	0.09

zung des Outputs ab. Die negativen Werte von EF mit Ausnahme von FF05 (EF=0.16) deuteten eine schlechte Abbildung der *NConc*-Dynamik an.

Der Fehler bei den Simulationen der Pflanzenhöhe der untersuchten Fruchtfolgen war gering ( $0.23 \leq nMAE \leq 0.36$ ). Die Entwicklung der Pflanzenhöhe der Fruchtarten von FF02 wurden dabei am besten simuliert ( $nMAE=0.23$ ,  $EF=0.76$ ). Am schlechtesten waren die Simulationsergebnisse von FF04 ( $nMAE = 0.36$ ,  $EF=-0.23$ ). Dabei traten die größten Abweichungen erneut bei den Simulationen der Ackerfuttermischungen auf.

Ebenfalls gute Ergebnisse erzielte das Modell bei der Simulation des Bodenwassergehalts. Mit Ausnahme von FF04 ( $EF=-0.08$ ) war das Modell gut in der Lage, die Dynamik des Bodenwasserhaushalts abzubilden.

Die Simulationen des  $N_{min}$ -Gehalts im Boden der obersten 90 cm wiesen hohe Abweichungen im Vergleich zu den gemessenen Werten auf. Der  $nMAE$  der untersuchten Fruchtfolgen lag zwischen 0.39 und 0.68. FF04 wies die größte Streuung bei den Simulationen unterschiedlicher Versuchsstandorte auf. Die besten Ergebnisse von FF04 wurden bei Simulationen von Gülzow ( $nMAE= 0.4$ ) und Ascha ( $nMAE= 0.41$ ) erzielt. Die hohen  $nMAE$ -Werte bei den Simulationen

des  $N_{\min}$ -Gehalts als auch die negativen EF-Werte zeigten, dass MONICA die N-Dynamik der untersuchten Fruchtfolgen schlecht abbildet. Das Modell neigte bei den Simulationen – mit Ausnahme von FF04 – zur Unterschätzung der gemessenen  $N_{\min}$ -Werte.

## 6.4 Diskussion

Das Ziel der Parametrisierung von MONICA war die Entwicklung von Parametersätzen für unkalibrierte Fruchtarten, die Teil der Fruchtfolgeversuche der EVA-Projekte waren. Datengrundlage der Parametrisierung bildeten die Messdaten der Fruchtfolgeversuche von EVA und EVA 2. Aufgrund der für eine Modellkalibrierung unzureichenden Datenbasis stellte die Parametrisierung von MONICA eine Herausforderung dar. Ausgehend von den sensitiven Modellparametern, die mit Hilfe der SA identifiziert wurden (Kapitel 5), erfolgte eine Kalibrierung des Modells für ausgewählte Fruchtarten der EVA-Projekte. Durch Anwendung des in HOPSPACK implementierten Optimierungsverfahren wurden für MONICA neue Parametersätze für unkalibrierte Fruchtarten entwickelt und bestehende Parametersätze von Mais und Klee gras für die Anwendung in den EVA-Projekten verbessert.

Zur Entwicklung und Anpassung der Modellparametersätze wurde das in HOPSPACK implementierte globale Optimierungsverfahren (GSS, Kapitel 4.3.1) eingesetzt. Ma et al. (2011) demonstrierten die Anwendbarkeit von HOPSPACK bei der Modellparametrisierung. HOPSPACK wurde in weiteren Anwendungen erfolgreich eingesetzt (Wieland et al. 2011; Chen et al. 2010). Eine Lösung des vorliegenden Optimierungsproblems wäre mit anderen globalen, ableitungsfreien Optimierungsverfahren wie z.B. dem Partikel-Schwarm-Optimierungsverfahren (Zambrano-Bigiarini and Rojas 2013; Jiang et al. 2010), den Evolutionsstrategien (Zhang et al. 2013; Jain and Srinivasulu 2008; Castanedo et al. 2006) oder Parameterschätzverfahren wie GLUE (Sreelash et al. 2012; Samaniego 2010) möglich gewesen. Wieland and Brüggemann (2013) demonstrierten die Effektivität verschiedener Optimierungsverfahren – trotz unterschiedlichem Laufzeitverhalten und Konvergenz – bei der Lösung eines Parameterschätzproblems. Als besonders leistungsfähig stellte sich dabei eine Kombination eines globalen und lokalen Optimierungsverfahren heraus, dass zunächst eine gute Näherung des Optimums durch eine globale Suche erreichte und anschließend eine Verfeinerung des Optimums durch Anwendung des lokalen Optimierungsverfahrens erzielte. In dieser Arbeit stand jedoch nicht der Vergleich verschiedener Optimierungs- bzw. Parametrisierungsverfahren zur Lösung des Optimierungsproblems von MONICA im Fokus, sondern die Entwicklung übertragbarer Parametersätze für unkalibrierte Fruchtarten unter Verwendung der eingeschränkten Datenbasis. Für diese Anwendung stellte das in HOPSPACK implementierte Verfahren eine geeignete Lösung dar. Ein weiterer Vorteil der Verwendung von HOPSPACK war die Möglichkeit zur Ausführung der Optimierung auf dem ZALF Rechner-Cluster mit einer deutlichen Reduzierung der Ausführungszeit der Parameter-Optimierungen.

Tests der Optimierungsconfiguration demonstrierten die Notwendigkeit einer multikriteriellen Optimierung zur Vermeidung der Überspezialisierung von Modellparametern an einem Output. Die in dieser Arbeit durchgeführte multikriterielle Optimierung setzte sich aus der Minimierung des nMAEs verschiedener Modelloutputs zusammen. Prinzipiell ist eine Erweiterung dieses Optimierungskriteriums durch Berücksichtigung anderer Modellgütemaße wie EF möglich. Die zusätzliche Integration von EF würde neben der Abweichung von Modell- und Messwerten ebenfalls die Fähigkeit des Modells zur Abbildung der Output-Dynamik bewerten. Die Berechnung von EF er-

forderte das Vorhandensein mehrerer Messwerte. Aufgrund der begrenzt vorhandenen Messdaten für eine Fruchtart – pro Fruchtart stand teilweise nur ein Messwert (Ertrag, N-Konzentration im Ertrag,  $N_{min}$  während des Anbaus der Frucht) zur Verfügung – war eine Berücksichtigung von EF bei der Kalibrierung nicht möglich.

Der Vergleich zwischen Modell- und Messwerten sowohl pflanzen- als auch bodenspezifischer Outputs bei der Kalibrierung einer Fruchtart erfolgte anhand von Messwerten, die während der Entwicklung der Pflanze zwischen Aussaat und Ernte erhoben wurden. Die SA von MONICA zeigte, dass verschiedene Modellparameter wie *residueNRatio* Einfluss auf  $N_{min}$  im Boden auch nach der Ernte der Pflanze besaßen. Diese Parameter wurden trotz ihrer Sensitivität bezogen auf  $NConc$  bzw.  $N_{min}$  in der Modellkalibrierung nicht berücksichtigt, infolge ihrer größeren Relevanz für die Bodenprozesse beim Anbau der nachfolgenden Frucht. Aufgrund der fehlenden Zuordnungsmöglichkeit, inwieweit der  $N_{min}$ -Gehalt durch das Management der aktuell angebauten Frucht bzw. durch die Mineralisation und Umsetzung der verbliebenen Erntereste der Vorfrucht beeinflusst wurde, erfolgte eine Kalibrierung des Modells ausschließlich für Modellparameter, die einen direkten Einfluss auf Pflanzenprozesse ausübten. Die Kalibrierung der Parameter mit direktem Einfluss auf die Bodenumsetzungsprozesse erforderte das Vorhandensein hochaufgelöster Bodenmessdaten, die in den EVA-Projekten nicht verfügbar waren.

Die entwickelten Parametersätze ermöglichten die Simulation gesamter Fruchtfolgen der EVA-Projekte mit Hilfe von MONICA. Die Simulationen der Fruchtfolgen bildeten die Basis zur Abschätzung der Folgewirkungen des Energiepflanzenanbaus. Die Quantifizierung von Sickerwasser und Nitrataustrag erfolgte auf Basis der Simulationsergebnisse der Fruchtfolgen. Die Vergleiche zwischen Modell- und Messwerten zur Bewertung der Qualität der entwickelten Parametersätze zeigten, dass mit Hilfe der entwickelten Parametersätze die Dynamik des Ertrags, des Bodenwassergehalts und der Pflanzenhöhe der Standardfruchtfolgen von EVA und EVA 2 gut abgebildet werden können.

Die Ergebnisse zeigten, dass die Prozesse der N-Dynamik ( $NConc$  und  $N_{min}$ ) durch MONICA schlechter abgebildet wurden. Eine Analyse zur Ursache der schlechten Simulationsergebnisse ergab, dass die allgemeine Performanz einer Fruchtfolge oft durch die schlechte Abbildung einer einzelnen Frucht innerhalb der Fruchtfolge verursacht wurde. Aufgrund einer schlecht abgebildeten Fruchtart wurde die Gesamt-Performanz der Fruchtfolge negativ beeinflusst. Weiterhin ist zu berücksichtigen, dass pro pflanzenspezifischen Output in einer Fruchtfolge nur wenige Daten zur Verfügung standen. Messungen des Ertrags und der N-Konzentration erfolgten zur Ernte der Frucht, so dass innerhalb einer Fruchtfolge pro Fruchtart nur jeweils ein Messdatensatz zur Verfügung stand. Während MONICA die N-Dynamik in jedem Simulationszeitschritt berechnet, erfolgte der Vergleich der Vorhersagegenauigkeit des Modells nur zu einem Zeitpunkt bei Ernte der Frucht. Für eine detailliertere Bewertung der Modellqualität sind zeitlich feiner aufgelöste Messdaten erforderlich, die jedoch in dieser Arbeit nicht zur Verfügung standen. Ein Vergleich der Validierungsergebnisse anderer Ökosystemmodelle verdeutlicht, dass auch diese Modelle hohe Abweichungen bei der Simulation von  $N_{min}$  aufweisen (Batlle-Aguilar et al. 2012; Kersebaum et al. 2008; Nendel et al. 2007; Kersebaum 2007; Priesack et al. 2006; Nendel and Kersebaum 2004; Roloff et al. 1998; Grant 1995). Die Vorhersage von  $N_{min}$  stellt aktuell eine große Herausforderung dar, die bisher kein Ökosystemmodell zur vollen Zufriedenheit erfüllt.

Eine weitere Ursache der schlechten Performanz-Ergebnisse liegt in der Unsicherheit der Messdaten begründet, die gerade bei  $N_{min}$  besonders hoch ist. Ein Teil der Unsicherheit wird aufgrund

der hohen räumlichen Variabilität von  $N_{\min}$  im Boden verursacht. Untersuchungen zeigten, dass Schwankungen von 10 - 26 kg N ha<sup>-1</sup> zwischen benachbarten Bodenproben, die weniger als 5 m voneinander entfernt sind, möglich sind (Giebel et al. 2006). Eine weitere Unsicherheitsquelle stellt der Messfehler bei der analytischen Bestimmung des  $N_{\min}$ -Gehalts im Boden dar. Laut Richter et al. (1984) und Giebel et al. (2006) liegt dieser zwischen 5 und 10 kg N ha<sup>-1</sup> einer Bodenprobe.

Das Ziel der Modellkalibrierung war die Entwicklung eines allgemeingültigen Parametersatzes pro untersuchte Fruchtart, der bei Simulationen auf verschiedenen Standorten eingesetzt werden kann. Infolge dieses Ziels erfolgte die Kalibrierung unter Verwendung der Daten aller Versuchsstandorte von EVA. Eine Abbildung von Sortenunterschieden der einzelnen Fruchtarten war nicht vorgesehen. Auswertungen der Versuchsdaten von EVA zeigten, dass unterschiedliche Sorten in verschiedenen Versuchsjahren bzw. an den unterschiedlichen Versuchsstandorten eingesetzt wurden. Ein Teil der ermittelten Abweichungen zwischen Modell- und Messwerten lässt sich auf die vorhandenen Sortenunterschiede der angebauten Fruchtarten, die MONICA nicht abbilden kann, zurückführen.

Die zur Verfügung stehende Datengrundlage war nur eingeschränkt für eine Modellkalibrierung geeignet. Die Datenbasis lies eine direkte Ableitung von pflanzenspezifischen Parametern nicht zu. Aus diesem Grund erfolgte die Kalibrierung an wenigen Messdaten, die nur eingeschränkt den Verlauf der Pflanzenentwicklung bzw. die Beeinflussung des Pflanzenwachstums auf Bodenprozesse abbildeten. Zur Verbesserung der Modellparametersätze ist eine Kalibrierung unter Verwendung von detaillierten Messdaten, die speziell für eine Modellkalibrierung erhoben werden, erforderlich. Aufgrund der unzureichenden Abbildungsgenauigkeit bei Simulationen der Ackerfüttermischungen (Kleegras, Luzernegrass und Luzerne-Kleegrass) ist eine erneute Kalibrierung von MONICA für die Fruchtarten zu priorisieren.

## 7 Möglichkeiten und Konsequenzen der Vereinfachung von MONICA

In diesem Kapitel erfolgt eine Diskussion über realisierbare Modellvereinfachungen des MONICA-Modells. Es erfolgt eine Betrachtung von Schwächen und Defiziten des Modells, die eine Vereinfachung erforderlich machen. Mögliche Vorgehensweisen zur Modellvereinfachung sowie der Konsequenzen bei der Anwendung auf das MONICA-Modell werden diskutiert.

### 7.1 Ziel der Modellvereinfachung

Die Wahl einer geeigneten Vereinfachungsmethode ist abhängig vom Ziel, das mit der Vereinfachung erreicht werden soll. In dieser Arbeit erfolgt eine Untersuchung von geeigneten Modellvereinfachungsansätzen – anwendbar auf das MONICA-Modell – unter der Berücksichtigung folgender Randbedingungen:

1. Vereinfachung der Weiterentwicklung des Modells,
2. Erhaltung der zeitlichen und räumlichen Auflösung,
3. Bewahrung des prozessorientierten Modellansatzes und
4. Vereinfachung der Parametrisierung neuer Fruchtarten.

Zum einen wird das Ziel einer Verbesserung des Modell-Quellcodes zur Vereinfachung der Arbeit des Modellentwicklers verfolgt. Zum anderen zielen die untersuchten Modellvereinfachungsansätze auf eine Erleichterung der Anwendbarkeit des Modells auf andere Fragestellungen sowie auf eine Erhöhung der Robustheit des Modells ab. Aufgrund der schnellen Ausführungszeiten von MONICA wird eine Verbesserung des Laufzeitverhaltens des Modells in diesen Untersuchungen nicht angestrebt.

### 7.2 Anwendung verschiedener Vereinfachungstechniken

Im Folgenden wird eine Auswahl verschiedener, auf MONICA anwendbarer Modellvereinfachungsansätze vorgestellt, welche die zuvor spezifizierten Rahmenbedingungen erfüllen. Der aktuelle Modellzustand von MONICA bietet verschiedene Möglichkeiten zur Modellverbesserung, die durch Anwendung von Modellvereinfachungsansätzen erzielt werden können. Es erfolgt eine Beschreibung der Modelleigenschaften, die eine Verbesserung notwendig machen. Grundlegende Arbeitsschritte zur Anwendung des jeweiligen Vereinfachungsansatzes werden näher erläutert. Es erfolgt eine Beschreibung der resultierenden Verbesserungen sowie möglicher Konsequenzen für MONICA.

### 7.2.1 Verbesserung des Modell-Quellcodes

Infolge der Entwicklung von MONICA basierend auf Algorithmen des HERMES-Modells (Kersebaum und Richter 1991; Kersebaum 1989), enthält der MONICA-Quellcode verschiedene Strukturen und Code-Elemente, die direkt vom *True BASIC*-Quellcode von HERMES abgeleitet wurden. Aufgrund konzeptioneller Unterschiede zwischen *True BASIC* und C++ wurden – durch die direkte Ableitung des Quellcodes – verschiedene Vorteile von C++ bei der Implementierung von MONICA nicht genutzt. Aus software-technischer Sicht enthält das Modell mangelhafte Implementierungen, die eine Verbesserung des MONICA-Quellcodes erfordern.

Der Quellcode von MONICA bietet verschiedene Ansatzpunkte zur Verbesserung. Im Anschluss werden folgende drei ausgewählte Ansätze zur Vereinfachung des MONICA Quellcodes vorgestellt:

1. Entfernung überflüssigen Codes,
2. Vereinfachung einer Code-Sequenz und
3. Umstrukturierung des Quellcodes.

In Fowler and Beck (1999) werden weitere, allgemeine Maßnahmen zur Quellcodeverbesserung vorgestellt. Diese – obwohl ebenfalls für eine Modellvereinfachung von MONICA anwendbar – werden im weiteren Verlauf nicht weiter untersucht.

Die Verbesserung des Quellcodes dient der Erhöhung des Verständnisses über die Funktionsweise von MONICA. Weiterhin wird eine Erleichterung der Erweiterbarkeit des Modells sowie einer vereinfachten Problemfindung im Quellcode angestrebt. Die Veränderung des Quellcodes kann zur Minimierung der Laufzeit des Modells führen. Die Höhe der Laufzeitreduzierung ist jedoch minimal und aufgrund der schnellen Ausführungszeit von MONICA (Kapitel 5.4) für diese Untersuchungen irrelevant. Die Verbesserung des Quellcodes führt zu keinem veränderten Funktionsumfang des Modells. Zur Überprüfung des unveränderten Modellverhaltens ist ein Vergleich des originalen und verbesserten Modells erforderlich. Die Berechnung von Gütemaßen zur Bewertung der Modellsimulation kann für den Vergleich des Modellverhaltens des vereinfachten und originalen Modells eingesetzt werden.

#### Entfernung von überflüssigem Quellcode

Im Quellcode von MONICA sind Code-Sequenzen enthalten, die keine Funktion ausüben. Zur Behebung des Problems sind überflüssige Code-Stellen zu identifizieren und zu eliminieren, mit dem Ziel der Erhöhung der Lesbarkeit des Modell-Quellcodes.

#### Vereinfachung von Code-Sequenzen

Viele Entwickler neigen zur Implementierung einer 'eleganten' aber komplizierten Lösung (Wolfe 2004). Komplizierte Code-Abschnitte erschweren das Verständnis, die Fehlersuche und die Anpassung des Codes. Auch wenn eine einfache Lösung mehrere Code-Zeilen im Vergleich zur komplizierten Umsetzung benötigt, ist eine einfache Implementierung zur Verbesserung der Lesbarkeit des Modellquellcodes zu empfehlen (Wolfe 2004).

MONICA enthält verschiedene Code-Abschnitte, die Möglichkeiten zur Vereinfachung des Quellcodes bieten. Im Code-Beispiel 7.1 ist eine verschachtelte *IF*-Anweisung aufgrund eines in C++

möglichen kompakten Konstrukts dargestellt. Obwohl diese Anweisung sehr effizient ist, wird durch die kompakte Darstellungsform die Lesbarkeit des Code-Abschnitts stark reduziert. Das Code-Beispiel 7.2 stellt eine ausführlicher formulierte Implementierung des gleichen Sachverhalts dar. Obwohl mehrere Code-Zeilen verwendet wurden, ist diese Art der Realisierung aufgrund der verbesserten Lesbarkeit zu empfehlen.

Code-Beispiel 7.1: Kompakte IF-Anweisung.

```
Result Monica::runMonica(Env env)
{
    ...

    nextAbsolutePPApplicationDate = useRelativeDates ?
        nextPPApplicationDate.toAbsoluteDate(
            currentDate.year() +
                (nextPPApplicationDate.dayOfYear() > prevPPApplicationDate.dayOfYear()
                 ? 0 : 1), true) : nextPPApplicationDate;
    ...
}
```

Code-Beispiel 7.2: Vereinfachte Umsetzung der IF-Anweisung.

```
Result Monica::runMonica(Env env)
{
    ...

    if (useRelativeDates) {

        if (nextPPApplicationDate.dayOfYear() > prevPPApplicationDate.dayOfYear())
        {
            // test if the next application takes places in the next year
            nextAbsolutePPApplicationDate =
                nextPPApplicationDate.toAbsoluteDate(currentDate.year(), true);
        }
        else
        {
            nextAbsolutePPApplicationDate =
                nextPPApplicationDate.toAbsoluteDate(currentDate.year() + 1, true);
        }

    } else {
        nextAbsolutePPApplicationDate = nextPPApplicationDate;
    }

    ...
}
```

Zur Vereinfachung des Modell-Quellcodes ist eine Identifizierung von Code-Abschnitten erforderlich, bei denen eine vereinfachte Darstellung zur Verbesserung der Lesbarkeit führt. In Anlehnung an das aufgeführte Code-Beispiel führt die Ausformulierung kompakter IF-Abfragen zu einer erheblichen Steigerung der Lesbarkeit des Quellcodes. Weitere mögliche Vereinfachungen des MONICA-Codes ist die Verwendung nur einer Anweisung pro Code-Zeile (Wolfe 2004), wodurch eine verbesserte Lesbarkeit und Erweiterbarkeit des Codes erzielt wird.

### Umstrukturierung des Quellcodes

Die Implementierung des Modells spiegelt den modularen Aufbau der Modellstruktur (Kapitel 3.2, Abbildung 3.2) grundsätzlich wider. Allerdings erfolgte keine konsequente Umsetzung des modu-

laren Ansatzes. Im Modell werden beispielsweise verschiedene Zustandsvariablen wie die Höhe des Wassergehalts oder die Temperatur einer Bodenschicht in einer zentralen Datenstruktur gespeichert. Trotzdem erfolgt der Zugriff auf diese Variablen bzw. auf aggregierte Werte der Variablen nicht direkt über die spezifizierte Datenstruktur. In anderen Teilen des Modells wurden zusätzliche Methoden implementiert, mit deren Hilfe Werte der Datenstruktur aggregiert und abgefragt werden. Aufgrund dieser Implementierung ist der Zugriff auf diese Zustandsvariablen undurchsichtig. Zur Verbesserung des Quellcodes ist eine Umstrukturierung erforderlich, wobei die Implementierung einer klaren Struktur bei der Speicherung und beim Zugriff auf verschiedene Modellzustände folgt.

Ein weiteres Problem in MONICA stellt die Verwendung von innerhalb einer Klasse global definierten Variablen dar. Aufgrund der globalen Definition vieler Variablen ist der Zugriff auf diese nicht klar definiert. Es erfolgte keine konsequente Verwendung von Getter- und Setter-Methoden, so dass Methoden außerhalb der Klassendefinition ohne Weiteres auf diese Variablen zugreifen und diese verändern können. Zur besseren Strukturierung des Programms sind für alle global definierten Variablen Setter- und Getter-Methoden zu implementieren sowie diese Variablen innerhalb der Klasse als privat zu deklarieren. Die Definition dieser Zugriffsfunktionen erlaubt neben der Abfrage des Variablenwertes die Implementierung zusätzlicher Funktionalität wie z.B. das Sicherstellen eines gültigen Variablenwertes oder die Aggregation von Werten. Aufgrund der Implementierung von Setter- und Getter-Funktionen erfolgt eine Kapselung des Variablenzugriffs innerhalb der Klasse. Die Formulierung dieser Methoden ermöglicht die Veränderung der Implementierung der Variablen innerhalb der Klasse, ohne die öffentliche Schnittstelle der Klasse zu modifizieren.

Die vorgeschlagene Umstrukturierung erhöht die Modularität des MONICA-Modells. Einerseits wird so die Lesbarkeit des Quellcodes erhöht, andererseits können Teilmodelle leichter verändert bzw. ausgetauscht werden. Weiterhin wird durch eine starke Modularisierung die Verwendung von redundantem Code verringert. Aufgrund der Komplexität der vorzunehmenden Änderungen ist darauf zu achten, durch die Umstrukturierung des Quellcodes die Funktionsweise des Modells nicht zu verändern.

### 7.2.2 Konstantsetzen von Modellparametern

Aufgrund der Vielzahl der in MONICA abgebildeten Modellprozesse erfordert die Kalibrierung des Modells für neue Fruchtarten das Anpassen von über 100 Modellparametern (Kapitel 5.1). Das Konstantsetzen von nicht-relevanten Modellparametern reduziert die Anzahl der in einer Modellkalibrierung anzupassenden Parameter.

Zur Anwendung dieser Methode auf das MONICA-Modell ist zunächst eine Identifikation der nicht-relevanten Modellparameter erforderlich. Die SA von MONICA (Kapitel 5) liefert dabei wichtige Hinweise über den Einfluss verschiedener Modellparameter. Die Ergebnisse können sowohl zur Identifikation sensibler als auch nicht-sensibler Parameter verwendet werden. Die SA von MONICA zeigten jedoch eine starke Variabilität der Ergebnisse bei der Analyse verschiedener Fruchtarten und Outputs. Ebenfalls wurden veränderte Sensitivitätswerte bei der Verwendung eines anderen Simulationsszenarios festgestellt. Aus diesem Grund ist bei der Anwendung dieses Modellvereinfachungsansatzes eine individuelle SA unter Berücksichtigung des jeweilig aktiven Simulationsszenarios durchzuführen, um eine präzise Identifikation der irrelevanten Modellpara-



meter zu realisieren.

Neben der Identifikation der zu ersetzenden Modellparameter stellt die Wahl des konstanten Wertes einen wichtigen Schritt dieser Modellvereinfachung dar. Zeigler et al. (2000) unterbreitet den Vorschlag, den Modellparameter auf einen zufälligen Wert innerhalb des gültigen Wertebereichs zu setzen. Eine bessere Alternative stellt – wie von Cox et al. (2006) vorgeschlagen – die Verwendung des Mittelwertes eines Parameters dar. Eine Validierung des Outputs des vereinfachten Modells ist zur Bestätigung der Simulationsgüte beim Konstantsetzen von Modellparametern erforderlich.

Bei Anwendung des Ansatzes auf MONICA ist darauf zu achten, dass das vereinfachte Modell nur für die untersuchte Fragestellung, bzw. für die in den SA untersuchten Outputs eingesetzt werden kann. Eine Anwendung des vereinfachten Modells zur Betrachtung eines anderen Sachverhalts ist nur dann zulässig, wenn die veränderten Modellparameter ebenfalls nicht-sensitiv sind.

### 7.2.3 Ersetzung von Modellvariablen

In MONICA werden verschiedene Boden- und Pflanzenprozesse abgebildet, die vielfältige Anwendungsmöglichkeiten des Modells ermöglichen. Einige Modellzustände bzw. -variablen sind für Modelloutputs, die für die jeweilige Modellanwendung relevant sind, jedoch unerheblich. Durch die Ersetzung von Modellvariablen durch konstante Werte kann – aufgrund der resultierenden Reduzierung der Modellparameteranzahl – die Parametrisierung von MONICA erleichtert werden.

#### Allgemeine Überlegungen zum Ansatz

Durch die Ersetzung von Modellvariablen mit Konstanten erfolgt die Formulierung eines alternativen Modells mit reduzierter Modellkomplexität. Modellvariablen sind dabei Elemente, die unter Verwendung von Funktionen, Modellparametern und Eingangsvariablen während der Simulation berechnet werden. Beim Konstantsetzen von Modellvariablen fallen vereinzelt Code-sequenzen weg. Die Parametrisierung des Modells wird durch diese Modellvereinfachung erleichtert, da Modellparameter, die zur Berechnung der betrachteten Modellvariablen verwendet wurden, durch das Konstantsetzen dieser irrelevant geworden sind. Die Entwicklung alternativer Modelle erfordert die Überprüfung der resultierenden Modellperformanz. Dies stellt sicher, dass das vereinfachte Modell den gestellten Anforderungen bei der Modellanwendung entspricht.

Die Schwierigkeit dieser Modellvereinfachung besteht in der Identifikation der Modellvariablen und -komponenten, die – ohne einer starken Beeinflussung der Modellperformanz – konstant gesetzt werden können. Eine Möglichkeit besteht in der Durchführung von SA zur Identifikation irrelevanter Modellvariablen. Die SA des MONICA-Modells (Kapitel 5), in der eine Analyse der Modellparameter erfolgte, verdeutlichte jedoch, dass die Ergebnisse der SA in Abhängigkeit des untersuchten Outputs variierten. Weiterhin zeigten Untersuchungen eine veränderte Sensitivität der Modellparameter bei der Verwendung eines anderen Simulationsszenarios. Im Bezug auf die Modellvereinfachung bedeutet dies, dass die Identifikation einer Modellvariablen für eine gezielte Fragestellung zu erfolgen hat. Das Konstantsetzen birgt jedoch das Risiko einen Prozess zu unterdrücken, der bei Betrachtung eines anderen Sachverhalts relevant sein könnte. Aus diesem Grund ist diese Modellvereinfachung mit Sorgfalt für eine ausgewählte Fragestellung bzw. einen speziellen Anwendungsfall durchzuführen.

Eine weitere wichtige Fragestellung ist die Wahl des Ersatz-Wertes, mit dem die Modellvariable belegt wird. Der Ersatz-Wert ist so zu wählen, dass weitere Modellberechnungen erfolgreich durchgeführt werden können. Cox et al. (2006) schlägt die Verwendung des Mittelwerts der Modellvariablen vor. Dabei werden die Werte, welche von der Modellvariablen während der Simulation angenommen werden, aggregiert. Die Ersetzung einer Modellvariablen mit deren Mittelwert zeigt auf, ob die Berechnung der Modellvariablen während der Modellsimulation lohnenswert bzw. ob die Verwendung des Mittelwerts der Variablen ausreichend ist.

### Anwendung am MONICA-Modell

In Cox et al. (2006) wird eine Methodik zur Ersetzung von Modellvariablen vorgestellt, die auch für eine Vereinfachung von MONICA anwendbar ist. In ihrem Ansatz werden systematisch Modellvariablen durch ihren Mittelwert ersetzt. Es erfolgt eine Evaluierung der resultierenden Modelle durch verschiedene Modellgüte- und Modellkomplexitätsmaße (Kapitel 4.4). Mit Hilfe verschiedener Gütemaße wird das Modell identifiziert, bei dem die beste Modellperformanz unter Berücksichtigung der wünschenswerten Vereinfachung erzielt wird. Wichtig bei der Durchführung dieser Modellvereinfachung ist die Bewertung der Modellperformanz für die in der Modellanwendung relevanten Modelloutputs.

Bei der Anwendung des Ansatzes von Cox et al. (2006) auf das MONICA-Modell ist folgendes Vorgehen erforderlich:

1. Durchführung eines Simulationslaufs mit MONICA, um die Datenbasis zur Ermittlung der Mittelwerte verschiedener Modellvariablen zu schaffen.
2. Vorauswahl der zu untersuchenden Modellvariablen durch den Modellierer.
3. Auswahl von Modellgüte- und Modellkomplexitätsmaßen zur Evaluierung der vereinfachten Modelle.
4. Vorbereitende Untersuchung zur Identifizierung der zu ersetzenden Modellvariablen. In der Voruntersuchung wird jede Modellvariable der Vorauswahl in einer individuellen Analyse durch ihren Mittelwert ersetzt. Alle übrigen Modellvariablen werden wie üblich berechnet. Jede Modellvariable, die bei der Ersetzung zu keiner signifikanten Verschlechterung der Modellperformanz führt, wird für eine Ersetzung vorgemerkt.
5. Ausgehend von der Menge der Ersetzungskandidaten erfolgt die Erzeugung eines alternativen Modells für jede mögliche Kombination der Ersetzung der Modellvariablen. Die Anzahl der möglichen Modellformulierungen beträgt  $2^N$ , wenn  $N$  die Anzahl der zu ersetzenden Modellvariablen ist.
6. Evaluierung der erzeugten Alternativ-Modelle durch Modellgüte- und -komplexitätsmaße. Das einzusetzende Gütemaß ist individuell zu spezifizieren und abhängig vom Ziel der Modellvereinfachung und den zur Verfügung stehenden Validierungsdaten. Zur Bewertung können zum Einen Modellgütemaße wie Mean Absolute Error (MAE) oder EF (Vergleiche Kapitel 4.4) eingesetzt werden. Zum Anderen können die vereinfachten Modelle mit Hilfe von Modellkomplexitätsmaßen wie AIC oder BIC evaluiert werden (Vergleiche Kapitel 2.4.1). Das Modell mit dem besten Evaluierungsergebnis stellt das finale Ergebnis der Modellvereinfachung dar.

Ein Nachteil dieser Modellvereinfachung stellt die exponentielle Steigerung des Rechenaufwands bei steigender Anzahl der zu ersetzenden Modellvariablen dar. Weiterhin ist zu beachten, dass die erzielte Modellvereinfachung speziell für die analysierten Modelloutputs, d.h. für einen ausgewählten Anwendungsfall des Modells, durchgeführt wird. Bei Einsatz des vereinfachten Modells in einer anderen Fragestellung kann eine schlechtere Modellperformanz erzielt werden. Crout et al. (2009) und Cox et al. (2006) wiesen jedoch durch diese Art der Modellvereinfachung eine Überparametrisierung der untersuchten Originalmodelle nach. Sie erzielten eine verbesserte Modellperformanz der reduzierten Modelle bei Validierung an unabhängigen Daten.



## 8 Zusammenfassung und Ausblick

### 8.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit erfolgte zunächst eine umfassende Analyse des Agrarökosystemmodells MONICA basierend auf verschiedenen Untersuchungen der Parametersensitivität des Modells. Die Sensitivitätsanalysen zielten zum einen auf die Identifikation der relevanten Modellparameter ab. Zum anderen dienten die Analysen der Validierung des Modellverhaltens und der Erhöhung des Modellverständnisses.

In einer ersten SA wurde der Einfluss der Modellparameter auf die Entwicklung der oberirdischen Biomasse von 14 verschiedenen, für die Bioenergiegewinnung in Frage kommenden Fruchtarten und Anbaumischungen untersucht, u.a. Winterweizen, Wintergerste, Sommergerste, Sommertriticale, Klee gras und Luzerne gras als  $C_3$ -Pflanzen sowie Mais und Sudangras als  $C_4$ -Pflanzen. Zunächst wurde die Morris-Methode eingesetzt, um mit Hilfe weniger Modellsimulation sensitive Modellparameter zu identifizieren. Aus einer Grundgesamtheit von 108 Modellparametern konnten damit insgesamt 32 für die untersuchten Fruchtarten relevante Parameter identifiziert werden. Für diese erfolgte anschließend die Quantifizierung der Parametersensitivität durch Berechnung der Haupt- und Totaleffekte auf Basis der Extended FAST-Methode.

Durch Kombination einer Screening- und varianzbasierten SA-Methode erfolgte eine Reduktion des Rechenaufwands zur Quantifizierung der Parametersensitivität. Die Ergebnisse dieser SA zeigten, dass die Sensitivitäten und die Anzahl der relevanten Modellparameter für die untersuchten Fruchtarten variierten. Als Ursache dafür wurde zum einen das für jede Fruchtart zu Grunde liegende individuelle Anbauszenario und zum anderen der für jede Fruchtart individuell konfigurierte Parameterwertebereich identifiziert. Die Parameter zur Quantifizierung der maximalen Assimilationsrate sowie die der Wachstums- und Erhaltungsaumung waren für alle untersuchten Fruchtarten besonders sensitiv. Ein Zusammenhang zwischen physiologisch ähnlichen Pflanzen und den ermittelten Parametersensitivitäten konnte nicht nachgewiesen werden. Die Parametersensitivität von ähnlichen Fruchtarten unterschied sich teilweise erheblich. Beispielsweise zeigte der Vergleich der Winterungen für Winterweizen und Winterraps eine Sensitivität gegenüber der Vernalisationsanforderung auf, obwohl alle Fruchtarten dieser Kategorie die Vernalisation zur optimalen Pflanzenentwicklung benötigen.

In einer weiteren SA von MONICA wurden exemplarisch am Beispiel von Winterweizen die Parametersensitivitäten einzelner Modelloutputs, wie z.B. Ertrag, N-Konzentration in der Pflanze, Bodenwassergehalt oder  $N_{\min}$ , untersucht. Auch hier kam die Kombination der Morris- und der Extended FAST-Methode zur Anwendung. Mittels dieser SA erfolgte die Identifizierung der jeweilig sensitiven Parameter bezogen auf die untersuchten Outputs. Die Anzahl der sensitiven Modellparameter variierte in Abhängigkeit vom untersuchten Output. Für die Berechnung der Pflanzenhöhe waren nur fünf, für  $N_{\min}$  jedoch 26 Parameter relevant. Ein Vergleich der Parametersensitivität der untersuchten Outputs zeigte, dass verschiedene pflanzenspezifische Modelloutputs wie Blattfläche, Ertrag oder Sprossbiomasse ähnlich sensitive Modellparameter besaßen. Bei den

analysierten bodenspezifischen Outputs wie Bodenwassergehalt, -temperatur oder  $N_{\min}$  wurden keine ähnlichen Parametersensitivitäten festgestellt.

In einer abschließenden Untersuchung wurde die Variabilität der Parametersensitivität in Abhängigkeit von der Simulationszeit analysiert. Es erfolgte eine Erweiterung der Anwendung der Extended FAST-Methode durch die Berechnung von Haupt- und Totaleffekten der Parameter zu jedem Simulationszeitschritt. Die Untersuchung der Zeitabhängigkeit der Parametersensitivitäten zeigte, dass diese starken saisonalen Schwankungen unterliegen. Verschiedene pflanzenspezifische Parameter der frühen Entwicklungsstadien wiesen auch in späteren Entwicklungsstadien einen erhöhten Einfluss auf. Weiterhin verdeutlichte diese Untersuchung die Wechselwirkung zwischen Pflanze und Boden, da viele pflanzenspezifische Parameter auch nach der Ernte der Pflanze eine hohe Sensitivität auf bodenspezifische Outputs wie Bodenwassergehalt oder  $N_{\min}$  besaßen. Die Ergebnisse dieser SA führten zu einer Vertiefung des Modellverständnisses. Weiterhin wurde damit das erwartete Modellverhalten validiert.

Die eingesetzten Verfahren wurden eigenständig in Python programmiert und mit dem MONICA-Modell gekoppelt. Zur parallelen Ausführung auf dem zur Verfügung stehenden Rechen-Cluster wurden diese unter Verwendung von MPI implementiert. Für eine Quantifizierung der damit erzielten Zeitersparnis durch Ausführung der SA auf mehreren Prozessorkernen erfolgte die Umsetzung verschiedener Experimente am Beispiel der Extended FAST. Während die Modellsimulation von 20.000 Parameter-Samples unter Verwendung nur eines Prozessors ca. 4,7 h benötigte, erfolgte eine Reduktion der Ausführungszeit auf 9 min bei Verwendung von 48 Prozessoren mit einem resultierenden Speed-Up von 32.

Ein weiterer Fokus der Arbeit bildete die Erweiterung von MONICA durch Parametrisierung des Modells für neue Energiepflanzen wie Mais, Sudangras oder Luzerne-Gras, etc. Es wurde ein allgemeiner, auf andere Modelle übertragbarer Ansatz entwickelt, der eine Kalibrierung von MONICA unter Verwendung der zur Verfügung stehenden, eingeschränkten Datenbasis ermöglichte. Grundlage des Ansatzes bildeten die SA des MONICA-Modells, in denen eine Identifikation der sensitivsten Modellparameter erfolgte. Während der Parametrisierung wurden ausschließlich die Parameter angepasst, die in den SA als relevant eingestuft wurden. Es wurde die Optimierungsoftware HOPSPACK zur Ermittlung der optimalen Parameterbelegungen eingesetzt. Ausgehend von den zur Verfügung stehenden Daten für Ertrag, oberirdische Biomasse, N-Konzentration in der Biomasse, Pflanzenhöhe, Bodenwassergehalt und  $N_{\min}$  erfolgte eine Kalibrierung des Modells für verschiedene Fruchtarten.

Zur Evaluierung der entwickelten Modellparametersätze einzelner Fruchtarten wurden diese an unabhängigen Daten validiert. Gute Simulationsergebnisse wurden für Bodenwassergehalt, Ertrag und N-Konzentration in der Pflanze erzielt. Bei der Simulation von  $N_{\min}$  wurden teilweise erhebliche Abweichungen zwischen Simulations- und Messwerten ermittelt. Im Anschluss an die Kalibrierung erfolgte eine Anwendung der entwickelten Parametersätze für die Simulation verschiedener Fruchtfolgen. Die Vergleiche zwischen Modell- und Messwerten zeigten, dass mit Hilfe der entwickelten Parametersätze die Dynamik des Ertrags, des Bodenwassergehalts und der Pflanzenhöhe bei Simulation gesamter Fruchtfolgen gut von MONICA abgebildet wird. Schlechtere Simulationsergebnisse wurden bei der Abbildung der Prozesse der N-Dynamik (N-Konzentration in der Pflanze und  $N_{\min}$ ) erzielt.

In einer abschließenden Auswertung wurden Möglichkeiten zur Modellvereinfachung und deren Anwendbarkeit auf das MONICA-Modell untersucht. Zur Verbesserung der Nutzung und Wei-

terentwickelbarkeit des Modells durch den Modellierer erfolgte eine Analyse verschiedener Ansätze zur Verbesserung des Modell-Quellcodes. Es wurde gezeigt, dass eine Vereinfachung von Quellcode-Sequenzen trotz Erhöhung der Code-Zeilenzahl zu einer erheblichen Verbesserung der Lesbarkeit und des Modellverständnisses führt. Als weitere, wenn auch schwieriger zu realisierende Quellcode-Verbesserung wurde die Möglichkeit zur Umstrukturierung des Quellcodes untersucht. Im Anschluss erfolgte die Betrachtung von zwei Ansätzen zur Verbesserung des Modells für den Modellanwender. Zum einen wurde die Möglichkeit zum Konstantsetzen von Modellparametern und dessen Konsequenz für das MONICA-Modell beschrieben. Zum anderen wurde ein Ansatz zur Ersetzung von Modellvariablen erarbeitet, bei dem eine Überführung von dynamischen Modellvariablen in statische Größen erfolgt. Es erfolgte die Beschreibung einer Vorgehensweise zur Umsetzung des Ansatzes für das MONICA-Modell.

## 8.2 Ausblick

MONICA lässt sich zur Beantwortung vielfältiger, ökologischer Fragestellungen beim Anbau ein- und mehrjähriger Feldfrüchte einsetzen. Mit Hilfe des Modells können Auswirkungen veränderter ackerbaulicher Anbauverfahren auf Ertragsbildung verschiedener Fruchtarten sowie auf N-Nährstoffausträge im Boden bzw. in der Atmosphäre auf der Feld-Skala untersucht werden. Die Weiterentwicklung des MONICA-Modells durch Parametrisierung neuer Fruchtarten bildet die Grundlage für den Einsatz des Modells zur Abschätzung der Folgewirkungen des Energiepflanzenanbaus. Zur Identifikation optimaler Anbausysteme des Energiepflanzenanbaus können nun Zusammenhänge zwischen der Fruchtfolgegestaltung und Umweltfaktoren wie Grundwasserneubildung oder Nitrataustrag untersucht werden.

Für eine verbreitete Anwendung des Modells durch Erhöhung der Bedienerfreundlichkeit ist die Entwicklung einer grafischen Benutzeroberfläche (GUI) erforderlich. Im Rahmen der Entwicklung einer GUI für MONICA ist die bereits vorhandene dateibasierte Schnittstelle zu überarbeiten. Dadurch wird der Zugriff auf neu realisierte Funktionen des Modells, wie die Simulation mehrjähriger Pflanzen, multiple Biomasseschnitte oder mehrfache Bodenbearbeitungsschritte, realisiert. Diese Funktionen stehen momentan bei Nutzung der vorhandenen, dateibasierten Schnittstelle nicht zur Verfügung.

Die nächste Stufe der Modellanwendung von MONICA stellt der flächenbezogene Einsatz des Modells dar. Durch eine Überführung von MONICA in die Fläche kann das Modell unter den gegenwärtigen Gesichtspunkten des sich verändernden Klimas zur Klimafolgenanpassung bei der Analyse von Klimaszenarien eingesetzt werden. Die flächendeckende Anwendung des Modells ist aufgrund der eingeschränkten Datenverfügbarkeit jedoch eine Herausforderung. Viele Eingangsdaten des Modells wie Informationen zum Boden (z.B. Bodenhorizontierung, Bodencharakteristika) oder zur Meteorologie (z.B. Windgeschwindigkeit, relative Luftfeuchte) stehen oft nicht flächendeckend zur Verfügung.

Eine Möglichkeit zur Umgehung der eingeschränkten Datenverfügbarkeit stellt die Approximation von Eingangsdaten auf Basis weniger Punktinformationen dar. Allerdings wird so die Unsicherheit in der Modellaussage aufgrund der erhöhten Unsicherheit in den Modelleingangsvariablen erhöht. Eine weitere Lösung ist die Reduktion des Modellfunktionsumfangs, so dass weniger Eingangsgrößen benötigt werden. Als vorbereitende Untersuchung ist die Durchführung einer Sensitivitätsanalyse der modelltreibenden meteorologischen Inputs, mit dem Ziel der Identifikation

der modellrelevanten Eingangsgrößen, erforderlich. Möglicherweise werden so Eingangsvariablen identifiziert, die nicht für die zu betrachtende Fragestellung benötigt werden. Weiterhin könnten Modellprozesse durch Teilmodellalternativen, die auf Fuzzy Modellen oder Neuronalen Netzen basieren (Wieland et al. 2013), ersetzt werden. Durch die Integration von alternativen Ansätzen wird die Robustheit des Modells erhöht, da ein Modelleinsatz auch bei reduzierter Datenverfügbarkeit möglich ist. Andererseits wird durch die Wahl anderer Modellansätze die Parameterkompatibilität der Teilmodelle von MONICA gestört. Die Integration von alternativen Teilmodellen erfordert eine vollständige Neu-Parametrisierung und Validierung des Modells.

Eine weiterführende flächenbasierte Anwendung des Modells stellt die Integration von MONICA in einem dynamischen Entscheidungsunterstützungssystem (DSS) dar. In einer solchen interaktiven dialoggestützten Anwendung ist eine Rechenzeitorientierung von MONICA zur Verkürzung der Reaktionszeit bei Ausführung des Modells innerhalb des DSS erforderlich. Die praktische Nutzung von MONICA im LandCaRe-DSS (Wenkel et al. 2013) zeigt, dass aktuell Simulationsrechnungen mit MONICA nur für kleine Regionen möglich sind. Einerseits wird dies bedingt durch die eingeschränkte Datenverfügbarkeit bei der flächenbasierten Simulation. Andererseits limitiert die lange Ausführungszeit von MONICA die Berechnung großer Regionen. Sowohl zur Minimierung der Ausführungszeit als auch zur Einschränkung des Datenbedarfs ist eine Vereinfachung von MONICA bei der Integration in ein DSS unverzichtbar.



# Literaturverzeichnis

- Abrahamsen, P., Hansen, S., 2000. Daisy: an open soil-crop-atmosphere system model. *Environmental Modelling Software* 15, 313–330.
- Ad-Hoc-Arbeitsgruppe Boden, 2005. Bodenkundliche Kartieranleitung. Hrsg.: Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe in Zusammenarbeit mit den Staatlichen Geologischen Diensten der Bundesrepublik Deutschland. 5. verbesserte und erweiterte Auflage, Hannover, 438 S.
- Adams, B.M., Bohnhoff, W.J., Dalbey, K.R., Eddy, J.P., Eldred, M.S., Gay, D.M., Haskell, K., Hough, P.D., Swiler, L.P., 2009. DAKOTA, A Multilevel Parallel Object-Oriented Framework for Design Optimization, Parameter Estimation, Uncertainty Quantification, and Sensitivity Analysis: Version 5.0 User's Manual. Technical Report. Sandia Technical Report SAND2010-2183. Updated December 2010 (Version 5.1) Updated November 2011 (Version 5.2).
- Addiscott, T.M., Whitmore, A.P., 1987. Computer-simulation of changes in soil mineral nitrogen and crop nitrogen during autumn, winter and spring. *Journal of Agricultural Science* 109, 141–157.
- Ahmdal, G., 1967. Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities, in: AFIPS Conference Proceedings, pp. 483–485. Washington DC.
- Akaike, H., 1973. Information theory and an extension of the maximum likelihood principle, in: Second International Symposium on Information Theory, Akademia Kiado: Budapest, pp. 267–281.
- Akaike, H., 1998. Information Theory and an Extension of the Maximum Likelihood Principle, in: Parzen, E., Tanabe, K., Kitagawa, G. (Eds.), *Selected Papers of Hirotugu Akaike*. Springer New York. Springer Series in Statistics, pp. 199–213.
- Alexandrescu, A., 2013. Offizielle Webseite der Loki-Bibliothek. <http://loki-lib.sourceforge.net/>.
- Allen, R.G., Pereira, L.S., Raes, D., Smith, M., 1998. Crop evapotranspiration. Guidelines for computing crop water requirements. FAO Irrigation and Drainage Paper 56.
- Anton, C., Steinicke, H., 2012. Bioenergy Chances and Limits - National Recommendations. Technical Report. Leopoldina - National Academy of Sciences Germany.
- Arhonditsis, G.B., Brett, M.T., 2004. Evaluation of the current state of mechanistic aquatic biogeochemical modeling. *Marine Ecology Progress Series* 271, 13–26.
- Arlot, S., Celisse, A., 2010. A survey of cross-validation procedures for model selection. *Statistics Surveys* 4, 40–79.

- Armstrong, R., Gannon, D., Geist, A., Keahey, K., Kohn, S., McInnes, L., Parker, S., Smolinski, B., 1999. Toward a common component architecture for high-performance scientific computing, in: *High Performance Distributed Computing, 1999. Proceedings. The Eighth International Symposium on*, pp. 115–124.
- Barlow, J., 2009. Simplification: Ethical implications for modelling and simulation, pp. 432–438.
- Battle-Aguilar, J., Brovelli, A., Luster, J., Shrestha, J., Niklaus, P.A., Barry, D.A., 2012. Analysis of carbon and nitrogen dynamics in riparian soils: Model validation and sensitivity to environmental controls. *Science of the Total Environment* 429, 246–256.
- Beazley, D.M., 2003. Automated scientific software scripting with SWIG. *Future Generation Computer Systems* 19, 599 – 609. Tools for Program Development and Analysis. Best papers from two Technical Sessions, at ICCS2001, San Francisco, CA, USA, and ICCS2002, Amsterdam, The Netherlands.
- Beck, J.V., Arnold, K.J., 1977. *Parameter Estimation in Engineering and Science*. John Wiley & Sons.
- Beven, K., 1993. Prophecy, reality and uncertainty in distributed hydrological modelling. *Advances in Water Resources* 16, 41–51.
- Beven, K., Binley, A., 1992. The future of distributed models: Model calibration and uncertainty prediction. *Hydrological Processes* 6, 279–298.
- Beven, K., Freer, J., 2001. Equifinality, data assimilation, and uncertainty estimation in mechanistic modelling of complex environmental systems using the GLUE methodology. *Journal of Hydrology* 249, 11–29.
- Beven, K.J., 2012. *Rainfall-Runoff Modelling: The Primer*. *Advances in Mass Spectrometry in Biochemistry and Medicine*, John Wiley & Sons.
- Boost, 2013. Offizielle Webseite der Boost-Bibliothek. <http://www.boost.org>.
- Bulatewicz, T., Allen, A., Peterson, J.M., Staggenborg, S., Welch, S.M., Steward, D.R., 2013. The Simple Script Wrapper for OpenMI: Enabling interdisciplinary modeling studies. *Environmental Modelling & Software* 39, 283–294.
- Burnham, K.P., Anderson, D.R., 2002. *Model Selection and Multi-Model Inference: A Practical Information-Theoretic Approach*. Springer.
- Cacuci, D.G., 1981a. Sensitivity theory for nonlinear systems. I. Nonlinear functional analysis approach. *Journal of Mathematical Physics* 22, 2794–2802.
- Cacuci, D.G., 1981b. Sensitivity theory for nonlinear systems. II. Extensions to additional classes of responses. *Journal of Mathematical Physics* 22, 2803–2812.
- Campolonga, F., Saltelli, A., 1997. Sensitivity analysis of an environmental model: an application of different methods. *Reliability Engineering and System Safety* 57, 49–69.

- Campolongo, F., Cariboni, J., Saltelli, A., 2007. An effective screening design for sensitivity analysis of large models. *Environmental Modelling & Software* 22, 1509 – 1518. Modelling, computer-assisted simulations, and mapping of dangerous phenomena for hazard assessment.
- Cariboni, J., Gatelli, D., Liska, R., Saltelli, A., 2007. The role of sensitivity analysis in ecological modelling. *Ecological Modelling* 203, 167–182.
- Castanedo, F., Patricio, M.A., Molina, J.M., 2006. Evolutionary Computation Technique Applied to HSPF Model Calibration of a Spanish Watershed, in: Corchado, E., Yin, H., Botti, V., Fyfe, C. (Eds.), *Intelligent Data Engineering and Automated Learning – IDEAL 2006*. Springer Berlin Heidelberg. Volume 4224 of *Lecture Notes in Computer Science*, pp. 216–223.
- Chen, X., Summers, R., Yao, J., 2010. FEM based 3D tumor growth prediction for kidney tumor. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)* 6326 LNCS, 159–168.
- Chwif, L., Barretto, M.R.P., Paul, R.J., 2000. On simulation model complexity, in: *Simulation Conference, 2000. Proceedings*. Winter, pp. 449–455.
- Ciric, C., Ciffroy, P., Charles, S., 2012. Use of sensitivity analysis to identify influential and non-influential parameters within an aquatic ecosystem model. *Ecological Modelling* 246, 119 – 130.
- Confalonieri, R., 2012. Combining a weather generator and a standard sensitivity analysis method to quantify the relevance of weather variables on agrometeorological models outputs. *Theoretical and Applied Climatology* 108, 19–30.
- Confalonieri, R., Bellocchi, G., Bregaglio, S., Donatelli, M., Acutis, M., 2010a. Comparison of sensitivity analysis techniques: A case study with the rice model WARM. *Ecological Modelling* 221, 1897–1906.
- Confalonieri, R., Bellocchi, G., Tarantola, S., Acutis, M., Donatelli, M., Genovese, G., 2010b. Sensitivity analysis of the rice model WARM in Europe: Exploring the effects of different locations, climates and methods of analysis on model sensitivity to crop parameters. *Environmental Modelling & Software* 25, 479 – 488.
- Confalonieri, R., Rosenmund, A., Baruth, B., 2009. An improved model to simulate rice yield. *Agronomy for Sustainable Development* 29, 463–474.
- Costanza, R., Sklar, F.H., 1985. Articulation, accuracy and effectiveness of mathematical models: a review of freshwater wetland applications. *Ecological Modelling* 27, 45–68.
- Cox, G.M., Gibbons, J.M., Wood, A.T.A., Craigon, J., Ramsden, S.J., Crout, N.M.J., 2006. Towards the systematic simplification of mechanistic models. *Ecological Modelling* 198, 240–246.
- Crout, N.M.J., Tarsitano, D., Wood, A.T., 2009. Is my model too complex? Evaluating model formulation using model reduction. *Environmental Modelling & Software* 24, 1–7.

- Cukier, R.I., Fortuin, C.M., Shuler, K.E., Petschek, A.G., Schaibly, J.H., 1973. Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. I Theory. *The Journal of Chemical Physics* 59, 3873–3878.
- Cukier, R.I., Schaibly, J.H., Shuler, K.E., 1975. Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. III. Analysis of the approximations. *The Journal of Chemical Physics* 63, 1140–1149.
- Dalcín, L., Paz, R., Storti, M., 2005. MPI for Python. *Journal of Parallel and Distributed Computing* 65, 1108 – 1115.
- Daniel, C., 1973. One-at-a-time-plans. *Journal of the American Statistical Association* 68, 353–360.
- DeJonge, K.C., Ascough, J.C., Ahmadi, M., Andales, A.A., Arabi, M., 2012. Global sensitivity and uncertainty analysis of a dynamic agroecosystem model under different irrigation treatments. *Ecological Modelling* 231, 113–125.
- Draper, N.R., Smith, H., 1981. Applied regression analysis. Nr. Teil 766 in Wiley series in probability and mathematical statistics. Applied probability and statistics, Wiley.
- Drouet, J.L., Capian, N., Fiorelli, J.L., Blanfort, V., Capitaine, M., Duretz, S., Gabrielle, B., Martin, R., Lardy, R., Cellier, P., Soussana, J.F., 2011. Sensitivity analysis for models of greenhouse gas emissions at farm level. Case study of N<sub>2</sub>O emissions simulated by the CERES-EGC model. *Environmental Pollution* 159, 3156–3161.
- Edenhofer, O., Pichs-Madruga, R., Sokona, Y., 2011. IPCC Special Report on Renewable Energy Sources and Climate Change Mitigation. Technical Report.
- Edmonds, B., 2000. Complexity and Scientific Modelling.
- Eglese, R.W., 1990. Simulated annealing: A tool for operational research. *European Journal of Operational Research* 46, 271 – 281.
- Ehrgott, M., 2005. Multicriteria Optimization. Lectures notes in economics and mathematical systems, Springer.
- Estrada, V., Diaz, M.S., 2010. Global sensitivity analysis in the development of first principle-based eutrophication models. *Environmental Modelling & Software* 25, 1539–1551.
- Flynn, K.J., 2005. Castles built on sand: Dysfunctionality in plankton models and the inadequacy of dialogue between biologists and modellers. *Journal of Plankton Research* 27, 1205–1210.
- Forum, T.M., 1993. MPI: A Message Passing Interface.
- Fowler, M., Beck, K., 1999. Refactoring: Improving the Design of Existing Code. Object Technology Series, Addison-Wesley.
- Francos, A., Elorza, F.J., Bouraoui, F., Bidoglio, G., Galbiati, L., 2003. Sensitivity analysis of distributed environmental simulation models: understanding the model behaviour in hydrological studies at the catchment scale. *Reliability Engineering & System Safety* 79, 205 – 218.

- Frantz, F.K., 1995. A taxonomy of model abstraction techniques, in: Proceedings of the 27th conference on Winter simulation, pp. 1413–1420.
- Förster, E., Rönz, B., 1979. Methoden der Korrelations- und Regressionsanalyse. Verlag Die Wirtschaft Berlin.
- Gan, T.Y., Dlamini, E.M., Biftu, G.F., 1997. Effects of model complexity and structure, data quality, and objective functions on hydrologic modeling. *Journal of Hydrology* 192, 81–103.
- Giebel, A., Wendroth, O., Reuter, H.I., Kersebaum, K.C., Schwarz, J., 2006. How representatively can we sample soil mineral nitrogen? *Journal of Plant Nutrition and Soil Science* 169, 52–59.
- Golay, M.W., Seong, P.H., Manno, V.P., 1989. A measure of the difficulty of system diagnosis and its relationship to complexity. *International Journal of General Systems* 16, 1–23.
- Grant, R.F., 1995. Dynamics of energy, water, carbon and nitrogen in agricultural ecosystems: simulation and experimental validation. *Ecological Modelling* 81, 169–181.
- Griffin, J.D., Kolda, T.G., Lewis, R.M., 2008. Asynchronous parallel generating set search for linearly constrained optimization. *SIAM Journal on Scientific Computing* 30, 1892–1924.
- Hassan, A.E., Bekhit, H.M., Chapman, J.B., 2008. Uncertainty assessment of a stochastic groundwater flow model using GLUE analysis. *Journal of Hydrology* 362, 89–109.
- Helton, J.C., 1993. Uncertainty and sensitivity analysis techniques for use in performance assessment for radioactive waste disposal. *Reliability engineering and system safety* 42, 327–367.
- Henriksen, J.O., 2008. Taming the complexity dragon. *Journal of Simulation* 2, 3–17.
- Hooke, R., Jeeves, T.A., 1961. “Direct Search” Solution of Numerical and Statistical Problems. *Journal of the ACM* 8, 212–229.
- Hough, P., Kolda, T., Torczon, V., 2001. Asynchronous Parallel Pattern Search for Nonlinear Optimization. *SIAM Journal on Scientific Computing* 23, 134–156.
- Huber, D., Dangelmaier, W., 2009. Controlled simplification of material flow simulation models, in: Winter Simulation Conference, pp. 839–850.
- Hurvich, C.M., Tsai, C.L., 1989. Regression and time series model selection in small samples. *Biometrika* 76, 297–307.
- Iman, R.L., Conover, W.J., 1979. The use of rank transformation in regression. *Technometrics* 21, 499–509.
- Iman, R.L., Helton, J.C., 1988. An Investigation of Uncertainty and Sensitivity Analysis Techniques for Computer Models. *Risk Analysis* 8, 71–90.
- Innis, G.S., Rextad, E.A., 1983. Simulation model simplification techniques. *Simulation* 41, 7–15.
- Jacques, J., Lavergne, C., Devictor, N., 2006. Sensitivity analysis in presence of model uncertainty and correlated inputs. *Reliability Engineering and System Safety* 91, 1126–1134.

- Jain, A., Srinivasulu, S., 2008. Hydrologic Model Calibration Using Evolutionary Optimisation, in: Abraham, R.J., See, L.M., Solomatine, D.P. (Eds.), *Practical Hydroinformatics*. Springer Berlin Heidelberg. Volume 68 of *Water Science and Technology Library*, pp. 291–301.
- Janssen, H., 2013. Monte-Carlo based uncertainty analysis: Sampling efficiency and sampling convergence. *Reliability Engineering & System Safety* 109, 123 – 132.
- Janssen, P.H.M., Heuberger, P.S.C., 1995. Calibration of process-oriented models. *Ecological Modelling* 83, 55 – 66.
- Janssen, P.H.M., Slob, W., Rotmans, J., 1990. Sensitivity Analysis and Uncertainty Analysis: An Inventory of Ideas, Methods, and Techniques. RIVM Report No. 958805001 Bilthoven, The Netherlands (in Dutch).
- Jiang, Y., Liu, C., Huang, C., Wu, X., 2010. Improved particle swarm algorithm for hydrological parameter optimization. *Applied Mathematics and Computation* 217, 3207–3215.
- JRC, 2011. Simlab 3.2 - Software package for uncertainty and sensitivity analysis. Joint Research Centre of the European Commission. Downloadable for free at: <http://simlab.jrc.ec.europa.eu>.
- Jørgensen, S.E., 2002. Integration of ecosystem theories: a pattern. Ecology and Environment, Kluwer Academic Publishers.
- Juston, J., Andrén, O., Kätterer, T., Jansson, P.E., 2010. Uncertainty analyses for calibrating a soil carbon balance model to agricultural field trial data in Sweden and Kenya. *Ecological Modelling* 221, 1880–1888.
- Karanki, D.R., Kushwaha, H.S., Verma, A.K., Ajit, S., 2009. Uncertainty Analysis Based on Probability Bounds (P-Box) Approach in Probabilistic Safety Assessment. *Risk Analysis*.
- Kersebaum, K., 2007. Modelling nitrogen dynamics in soil–crop systems with HERMES. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 77, 39–52.
- Kersebaum, K.C., 1989. Die Simulation der Stickstoff-Dynamik von Ackerböden. Dissertation. Universität Hannover.
- Kersebaum, K.C., Richter, J., 1991. Modelling nitrogen dynamics in a plant-soil system with a simple model for advisory purposes. *Fertilizer Research* 27, 273–281.
- Kersebaum, K.C., Wurbs, A., de Jong, R., Campbell, C.A., Yang, J., Zentner, R.P., 2008. Long-term simulation of soil-crop interactions in semiarid southwestern Saskatchewan, Canada. *European Journal of Agronomy* 29, 1–12.
- Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D., Vecchi, M.P., 1983. Optimization by Simulated Annealing. *Science* 220, 671–680.
- Kolda, T.G., 2005. Revisiting asynchronous parallel pattern search for nonlinear optimization. *SIAM Journal on Optimization* 16, 563–586.
- Kolda, T.G., Lewis, R.M., Torczon, V., 2003. Optimization by direct search: New perspectives on some classical and modern methods. *SIAM Review* 45, 385–482.

- Kolda, T.G., Torczon, V.J., 2004. On the convergence of asynchronous parallel pattern search. *SIAM Journal on Optimization* 14, 939–964.
- Kucherenko, S., Tarantola, S., Annoni, P., 2012. Estimation of global sensitivity indices for models with dependent variables. *Computer Physics Communications* 183, 937–946.
- van Laarhoven, P.J.M., 1992. Simulated annealing theory and applications. Kluwer.
- Langtangen, H.P., 2009. A Primer on Scientific Programming with Python. Texts in Computational Science and Engineering, Springer.
- Laniak, G.F., Olchin, G., Goodall, J., Voinov, A., Hill, M., Glynn, P., Whelan, G., Geller, G., Quinn, N., Blind, M., Peckham, S., Reaney, S., Gaber, N., Kennedy, R., Hughes, A., 2013. Integrated environmental modeling: A vision and roadmap for the future. *Environmental Modelling & Software* 39, 3–23.
- Lawrie, J., Hearne, J., 2007. Reducing model complexity via output sensitivity. *Ecological Modelling* 207, 137–144.
- Lefantzi, S., Ray, J., Najm, H.N., 2003. Using the Common Component Architecture to design high performance scientific simulation codes, in: *Parallel and Distributed Processing Symposium, 2003. Proceedings. International*, p. 10 pp.
- Legates, D.R., McCabe Jr., G.J., 1999. Evaluating the use of 'goodness-of-fit' measures in hydrologic and hydroclimatic model validation. *Water Resources Research* 35, 233–241.
- Lewis, R.M., Torczon, V., Trosset, M.W., 1998. Why Pattern Search Works. ICASE technical report 98-57.
- Li, L., Xia, J., Xu, C.Y., Singh, V.P., 2010. Evaluation of the subjective factors of the GLUE method and comparison with the formal Bayesian method in uncertainty assessment of hydrological models. *Journal of Hydrology* 390, 210–221.
- Lu, Y., Mohanty, S., 2001. Sensitivity analysis of a complex, proposed geologic waste disposal system using the Fourier Amplitude Sensitivity Test method. *Reliability Engineering and System Safety* 72, 275–291.
- López-Cruz, I.L., Salazar-Moreno, R., Rojano-Aguilar, A., Ruiz-García, A., 2012. Global sensitivity analysis of a greenhouse lettuce (*Lactuca sativa* L.) crop model [Análisis de sensibilidad global de un modelo de lechugas (*Lactuca sativa* L.) cultivadas en invernadero]. *Agrociencia* 46, 383–397.
- Ma, S., Churkina, G., Wieland, R., Gessler, A., 2011. Optimization and evaluation of the ANTHRO-BGC model for winter crops in Europe. *Ecological Modelling* 222, 3662–3679.
- Makler-Pick, V., Gal, G., Gorfine, M., Hipsey, M.R., Carmel, Y., 2011. Sensitivity analysis for complex ecological models - A new approach. *Environmental Modelling & Software* 26, 124 – 134.
- Makowski, D., Wallach, D., Tremblay, M., 2002. Using a Bayesian approach to parameter estimation; comparison of the GLUE and MCMC methods. *Agronomie* 22, 191–203.

- Manache, G., Melching, C.S., 2008. Identification of reliable regression- and correlation-based sensitivity measures for importance ranking of water-quality model parameters. *Environmental Modelling & Software* 23, 549–562.
- Mannina, G., 2011. Uncertainty assessment of a water-quality model for ephemeral rivers using GLUE analysis. *Journal of Environmental Engineering* 137, 177–186.
- Mara, T., Tarantola, S., 2012. Variance-based sensitivity indices for models with dependent inputs. *Reliability Engineering and System Safety* 107, 115–121.
- Mara, T.A., 2009. Extension of the RBD-FAST method to the computation of global sensitivity indices. *Reliability Engineering & System Safety* 94, 1274 – 1281.
- Marsili-Libelli, S., 1992. Parameter estimation of ecological models. *Ecological Modelling* 62, 233–258.
- McKay, M.D., Beckman, R.J., Conover, W.J., 1979. Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code. *Technometrics* 21, 239–245.
- Mertens, J., Madsen, H., Feyen, L., Jacques, D., Feyen, J., 2004. Including prior information in the estimation of effective soil parameters in unsaturated zone modelling. *Journal of Hydrology* 294, 251–269.
- Meszaros, R., Zsely, I.G., Szinyei, D., Vincze, C., Lagzi, I., 2009. Sensitivity analysis of an ozone deposition model. *Atmospheric Environment* 43, 663 – 672.
- Min, J.H., Paudel, R., Jawitz, J.W., 2011. Mechanistic Biogeochemical Model Applications for Everglades Restoration: A Review of Case Studies and Suggestions for Future Modeling Needs. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology* 41, 489–516.
- Moore, R.V., Tindall, C.I., 2005. An overview of the open modelling interface and environment (the OpenMI). *Environmental Science and Policy* 8, 279–286.
- Morris, M.D., 1991. Factorial Sampling plans for preliminary computational experiments. *Technometrics* 33, 161–174.
- Munoz-Carpena, R., Zajac, Z., Kuo, Y.M., 2007. Global sensitivity and uncertainty analyses of the water quality model VFSMOD-W. *Transactions of the ASABE* 50, 1719–1732.
- Myung, J.I., Tang, Y., Pitt, M.A., 2009. Chapter 11 Evaluation and Comparison of Computational Models. *Methods in Enzymology* 454, 287–304.
- Nakariakov, S., 2013. *The Boost C++ Libraries: Generic Programming*. CreateSpace Independent Publishing Platform.
- Nash, J.E., Sutcliffe, J.V., 1970. River flow forecasting through conceptual models part I — A discussion of principles. *Journal of Hydrology* 10, 282 – 290.
- Nelder, J.A., Mead, R., 1965. A simplex-method for function minimization. *Computer Journal* 7, 308–313.



- Nendel, C., 2013. Offizielle Webseite des MONICA-Modells. <http://monica.agrosystem-models.com>.
- Nendel, C., Berg, M., Kersebaum, K.C., Mirschel, W., Specka, X., Wegehenkel, M., Wenkel, K.O., Wieland, R., 2011a. The MONICA model: Testing predictability for crop growth, soil moisture and nitrogen dynamics. *Ecological Modelling* 222, 1614 – 1625.
- Nendel, C., Berg, M., Kersebaum, K.C., Mirschel, W., Specka, X., Wenkel, K.O., Wieland, R., 2011b. Landcare DSS - Decision support meets interactivity, pp. 1244–1250.
- Nendel, C., Kersebaum, K., Mirschel, W., Manderscheid, R., Weigel, H.J., Wenkel, K.O., 2009. Testing different CO<sub>2</sub> response algorithms against a FACE crop rotation experiment. *NJAS - Wageningen Journal of Life Sciences* 57, 17–25.
- Nendel, C., Kersebaum, K.C., 2004. A simple model approach to simulate nitrogen dynamics in vineyard soils. *Ecological Modelling* 177, 1–15.
- Nendel, C., Kersebaum, K.C., Nieder, R., Kubiak, R., 2007. Nitrogen mineralization from mature bio-waste compost in vineyard soils. III Simulation of soil mineral-nitrogen dynamics. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science* 170, 598–607.
- Niemeier, W., 2008. Ausgleichungsrechnung. Walter de Gruyter.
- Nilsen, J.K., 2007. MontePython: Implementing Quantum Monte Carlo using Python. *Computer Physics Communications* 177, 799 – 814.
- Ortega, J., Rockoff, M., 1966. Nonlinear Difference Equations and Gauss-Seidel Type Iterative Methods. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 3, 497–513.
- Pacheco, P., 2011. An Introduction to Parallel Programming. An Introduction to Parallel Programming, Elsevier Science.
- Pan, F., Zhu, J., Ye, M., Pachepsky, Y.A., Wu, Y.S., 2011. Sensitivity analysis of unsaturated flow and contaminant transport with correlated parameters. *Journal of Hydrology* 397, 238–249.
- Paudel, R., Jawitz, J.W., 2012. Does increased model complexity improve description of phosphorus dynamics in a large treatment wetland? *Ecological Engineering* 42, 283–294.
- Perrin, C., Michel, C., Andréassian, V., 2001. Does a large number of parameters enhance model performance? Comparative assessment of common catchment model structures on 429 catchments. *Journal of Hydrology* 242, 275–301.
- PIK, 2011. SimEnv 2.11 - A Multi-Run Simulation Environment for Quality Assurance and Scenario Analyses. <http://www.pik-potsdam.de/software/simenv/>.
- Plantenga, T.D., 2009. HOPSPACK 2.0 User Manual. Technical Report SAND2009-6265. Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM and Livermore, CA.
- Plantenga, T.D., 2012. Offizielle Webseite von HOPSPACK.
- Priesack, E., Gayler, S., Hartmann, H.P., 2006. The impact of crop growth sub-model choice on simulated water and nitrogen balances. *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 75, 1–13.

- Rahn, C.R., Zhang, K., Lillywhite, R., Ramos, C., Doltra, J., de Paz, J.M., Riley, H., Fink, M., Nendel, C., Thorup-Kristensen, K., Pedersen, A., Piro, F., Venezia, A., Firth, C., Schmutz, U., Rayns, F., Strohmeyer, K., 2010. EU-Rotate\_N - A decision support system - To predict environmental and economic consequences of the management of nitrogen fertiliser in crop rotations. *European Journal of Horticultural Science* 75, 20–32.
- Rechenberg, I., 1972. *Evolutionsstrategie*. Friedrich Frommann Verlag, Stuttgart.
- Rexstad, E.A., Innis, G.S., 1985. Model Simplification – Three Applications. *Ecological modeling*.
- Rice, J.A., 2007. *Mathematical Statistics and Data Analysis*. Duxbury Press, Belmont, CA.
- Richter, J., Nordmeyer, H., Kersebaum, K.C., 1984. Confidence-interval of the  $n_{min}$ -analysis. *Journal of Agronomy and Crop Science* 153, 285–296.
- Roloff, G., de Jong, R., Campbell, C.A., Zentner, R.P., Benson, V.M., 1998. EPIC estimates of soil water, nitrogen and carbon under semiarid temperate conditions. *Canadian Journal of Soil Science* 78, 551–562.
- Sachs, L., Hedderich, J., 2006. *Angewandte Statistik*.
- Sachs, L., Hedderich, J., 2009. *Angewandte Statistik: Methodensammlung Mit R*. Springer.
- Saisana, M., Saltelli, A., Tarantola, S., 2005. Uncertainty and sensitivity analysis techniques as tools for the quality assessment of composite indicators. *Journal of the Royal Statistical Society: Series A (Statistics in Society)* 168, 307–323.
- Saltelli, A., 2002. Sensitivity analysis for importance assessment. *Risk Analysis* 22, 579–590.
- Saltelli, A., 2008. *Global sensitivity analysis: the primer*. John Wiley.
- Saltelli, A., Andres, T.H., Homma, T., 1993. Sensitivity analysis of model output: An investigation of new techniques. *Computational Statistics & Data Analysis* 15, 211 – 238.
- Saltelli, A., Annoni, P., 2010. How to avoid a perfunctory sensitivity analysis. *Environmental Modelling & Software* 25, 1508 – 1517.
- Saltelli, A., Bolado, R., 1998. An alternative way to compute Fourier amplitude sensitivity test (FAST). *Computational Statistics & Data Analysis* 26, 445 – 460.
- Saltelli, A., Chan, K., Scott, E.M.E., 2000. *Sensitivity Analysis*. John Wiley & Sons, Ltd. 1 Edition.
- Saltelli, A., Ratto, M., Tarantola, S., Campolongo, F., 2006. Sensitivity analysis practices: Strategies for model-based inference. *Reliability Engineering & System Safety* 91, 1109 – 1125. The Fourth International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output (SAMO 2004) - SAMO 2004.
- Saltelli, A., Sobol', I.M., 1995. About the use of rank transformation in sensitivity analysis of model output. *Reliability Engineering & System Safety* 50, 225 – 239.

- Saltelli, A., Tarantola, S., Chan, K.P.S., 1999. A quantitative model-independent method for global sensitivity analysis of model output. *Technometrics* 41, 39–56.
- Samaniego, F.J., 2010. *A Comparison of the Bayesian and Frequentist Approaches to Estimation*. Springer, New York.
- Satterthwaite, F., 1959. Random balance experimentation. *Technometrics* 1.
- Scheffer, F., Schachtschabel, P., 1998. *Lehrbuch der Bodenkunde*. 14. Auflage, Ferdinand Enke Verlag.
- Schmitt, L.M., 2001. Theory of genetic algorithms. *Theoretical Computer Science* 259, 1 – 61.
- Schmitt, L.M., 2004. Theory of Genetic Algorithms II: models for genetic operators over the string-tensor representation of populations and convergence to global optima for arbitrary fitness function under scaling. *Theoretical Computer Science* 310, 181 – 231.
- Schwarz, G., 1978. Estimating the Dimension of a Modell. *The Annals of Statistics* 6, 461–464.
- Schwefel, H., 1995. *Evolution and optimum seeking*. Bd. 1, Wiley.
- Schwieger, V., 2005. Nicht-lineare Sensitivitätsanalyse gezeigt an Beispielen zu bewegten Objekten. DGK, Reihe C, Heft 581, München.
- Schöne, F., 2007. Anforderungen an die Energiepflanzenproduktion aus Sicht des Natur- und Umweltschutzes. Symposium Energiepflanzen 2007, Berlin.
- Schöneburg, E., Heinzmann, F., Feddersen, S., 1994. *Genetische Algorithmen und Evolutionstrategien: Eine Einführung in Theorie und Praxis der Simulierten Evolution*. Addison-Wesley Verlag.
- Seber, G.A.F., Wild, C.J., 2003. *Nonlinear Regression*. Wiley Series in Probability and Statistics, Wiley.
- Shaeffer, D.L., 1980. Model evaluation methodology applicable to environmental assessment. *Ecological Modelling* 8, 275–295.
- Simon, H.A., 1962. The architecture of complexity, in: *Proceedings of the American Philosophical Society*, pp. 467–482.
- Sin, G., Gernaey, K.V., 2009. Improving the Morris method for sensitivity analysis by scaling the elementary effects, in: Jezowski, J., Thullie, J. (Eds.), *19th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*. Elsevier. Volume 26 of *Computer Aided Chemical Engineering*, pp. 925 – 930.
- Sin, G., Gernaey, K.V., Neumann, M.B., van Loosdrecht, M.C.M., Gujer, W., 2011. Global sensitivity analysis in wastewater treatment plant model applications: Prioritizing sources of uncertainty. *Water Research* 45, 639 – 651.
- Sin, G., Lantz, A.E., Gernaey, K.V., 2009. Sensitivity Analysis of Non-Linear Dynamic Models: Prioritizing Experimental Research, in: *10th International Symposium on Process Systems Engineering: Part A*. Elsevier. Volume 27 of *Computer Aided Chemical Engineering*, pp. 267 – 272.

- Snowling, S.D., Kramer, J.R., 2001. Evaluating modelling uncertainty for model selection. *Ecological Modelling* 138, 17–30.
- Sobol', I.M., 1993. Sensitivity analysis for non linear mathematical models. *Mathematical Modelling and Computational Experiment* 1, 407–414.
- Sobol', I.M., Kucherenko, S., 2010. Derivative based global sensitivity measures. *Procedia - Social and Behavioral Sciences* 2, 7745 – 7746.
- Sreelash, K., Sekhar, M., Ruiz, L., Tomer, S.K., Guérif, M., Buis, S., Durand, P., Gascuel-Odoux, C., 2012. Parameter estimation of a two-horizon soil profile by combining crop canopy and surface soil moisture observations using GLUE. *Journal of Hydrology* 456-457, 57–67.
- Tarantola, S., Gatelli, D., Mara, T.A., 2006. Random balance designs for the estimation of first order global sensitivity indices. *Reliability Engineering & System Safety* 91, 717 – 727.
- Thomas, P., Choffel, D., Thomas, A., 2008. Simulation reduction models approach using neural network, pp. 679–684. *Proceedings - UKSim 10th International Conference on Computer Modelling and Simulation, EUROSIM/UKSim2008*.
- Torczon, V., 1997. On the convergence of pattern search algorithms. *SIAM Journal on Optimization* 7, 1–25.
- Tremblay, M., Wallach, D., 2004. Comparison of parameter estimation methods for crop models. *Agronomie* 24, 351–365.
- Van Keulen, H., Penning de Vries, F.W.T., Drees, E.M., 1982. Summary model for crop growth. *Simulation of plant growth and crop production*. PUDOC, Wageningen , 87–97.
- Van Oijen, M., Rougier, J., Smith, R., 2005. Bayesian calibration of process-based forest models: Bridging the gap between models and data. *Tree Physiology* 25, 915–927.
- Vetter, A., Nehring, A., Ebel, G., Peters, J., Grunewald, J., Kruse, S., Deiglmayr, K., Wilken, F., 2011. Schriftliche Mitteilung. Datenmaterial aus den Bonituren des deutschlandweiten Verbundprojektes EVA. Technical Report. Thüringer Landesanstalt für Landwirtschaft. FKZ 22013008.
- Voinov, A., Cerco, C., 2010. Model integration and the role of data. *Environmental Modelling & Software* 25, 965–969.
- Voinov, A., Shugart, H.H., 2013. 'Integronsters', integral and integrated modeling. *Environmental Modelling & Software* 39, 149–158.
- Wallach, D., Makowski, D., Jones, J.W., 2006. *Working with dynamic crop models: evaluation, analysis, parameterization, and applications*. Elsevier.
- Wegehenkel, M., 2000. Test of a modelling system for simulating water balances and plant growth using various different complex approaches. *Ecological Modelling* 129, 39 – 64.

- Wenkel, K.O., Berg, M., Mirschel, W., Wieland, R., Nendel, C., Köstner, B., 2013. LandCaRe DSS - An interactive decision support system for climate change impact assessment and the analysis of potential agricultural land use adaptation strategies. *Journal of Environmental Management* Article in Press.
- Wenkel, K.O., Berg, M., Wieland, R., Mirschel, W., 2010a. Vorsorge und Gestaltungspotenziale in ländlichen Räumen unter regionalen Wetter- und Klimaänderungen (LandCaRe 2020) PT-DLR 01 LS 05104 : Modelle und Entscheidungsunterstützungssystem zur Klimafolgenabschätzung und Ableitung von Adaptationsstrategien der Landwirtschaft an veränderte Klimabedingungen (AGROKLIM-ADAPT) ; Teilprojekt 6 (DSS). Technical Report. Leibniz-Zentrum für Agrarlandschaftsforschung (ZALF). Schlussbericht.
- Wenkel, K.O., Nendel, C., K.-C., K., Mirschel, W., Specka, X., 2010b. Vorsorge und Gestaltungspotenziale in ländlichen Räumen unter regionalen Wetter- und Klimaänderungen (LandCaRe 2020) PT-DLR 01 LS 05104 : : Modelle und Entscheidungsunterstützungssystem zur Klimafolgenabschätzung und Ableitung von Adaptationsstrategien der Landwirtschaft an veränderte Klimabedingungen (AGROKLIM-ADAPT) ; Teilprojekt 4 (Modellbasis). Technical Report. Leibniz-Zentrum für Agrarlandschaftsforschung (ZALF). Schlussbericht.
- White, J.W., Hoogenboom, G., Kimball, B.A., Wall, G.W., 2011. Methodologies for simulating impacts of climate change on crop production. *Field Crops Research* 124, 357–368.
- Wieland, R., Brüggemann, R., 2013. Einsatz dynamischer Fuzzymodelle in der Ökosystemmodellierung, in: *Simulation in Umwelt- und Geowissenschaften: Workshop Leipzig, Aachen* (Shaker). Article in Press.
- Wieland, R., Dalchow, C., Sommer, M., Fukuda, K., 2011. Multi-Scale Landscape Analysis (MS-LA) - A method to identify correlation of relief with ecological point data. *Ecological Informatics* 6, 164–169.
- Wieland, R., Mirschel, W., Deumlich, D., 2012. Parallel implementation to support large spatial simulations, in: Seppelt, R., Voinov, A.A., Lange, S., Bankamp, D. (Eds.), *International Environmental Modelling and Software Society (iEMSs) 2012 International Congress on Environmental Modelling and Software. Managing Resources of a Limited Planet: Pathways and Visions under Uncertainty, Sixth Biennial Meeting, Leipzig, Germany*, pp. 1247–1254.
- Wieland, R., Mirschel, W., Nendel, C., Specka, X., 2013. Dynamic fuzzy models in agroecosystem modeling. *Environmental Modelling & Software* Article in Press.
- Willmott, C.J., Matsuura, K., 2005. Advantages of the mean absolute error (MAE) over the root mean square error (RMSE) in assessing average model performance. *CLIMATE RESEARCH* 30, 79–82.
- Wolfe, H., 2004. KISS - Keep it simple stupid. *Computer Fraud and Security* 5, 11.
- Wu, Q.L., Cournède, P.H., Mathieu, A., 2012. An efficient computational method for global sensitivity analysis and its application to tree growth modelling. *Reliability Engineering and System Safety* 107, 35–43.

- Xu, C., Gertner, G., 2007. Extending a global sensitivity analysis technique to models with correlated parameters. *Computational Statistics and Data Analysis* 51, 5579–5590.
- Yang, J., Liu, Y., Yang, W., Chen, Y., 2012. Multi-Objective Sensitivity Analysis of a Fully Distributed Hydrologic Model WetSpa. *Water Resources Management* 26, 109–128.
- Ye, W., Bates, B.C., Viney, N.R., Sivapalan, M., Jakeman, A.J., 1997. Performance of conceptual rainfall-runoff models in low-yielding ephemeral catchments. *Water Resources Research* 33, 153–166.
- Zador, J., Zsely, I., Turanyi, T., 2006. Local and global uncertainty analysis of complex chemical kinetic systems. *Reliability Engineering & System Safety* 91, 1232 – 1240. The Fourth International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output (SAMO 2004) - SAMO 2004.
- Zambrano-Bigiarini, M., Rojas, R., 2013. A model-independent Particle Swarm Optimisation software for model calibration. *Environmental Modelling & Software* 43, 5–25.
- Zeigler, B.P., 1979. *Multi-Level, Multi-Formalism Modelling: an Ecosystem Example*. Theoretical Systems Ecology, Academic Press. New York.
- Zeigler, B.P.A., Prähofer, H., Kim, T.G., 2000. *Theory of Modeling and Simulation: Integrating Discrete Event and Continuous Complex Dynamic Systems*. Academic Press.
- Zhang, X., Beeson, P., Link, R., Manowitz, D., Izaurralde, R.C., Sadeghi, A., Thomson, A.M., Sahajpal, R., Srinivasan, R., Arnold, J.G., 2013. Efficient multi-objective calibration of a computationally intensive hydrologic model with parallel computing software in Python. *Environmental Modelling & Software* .

# Anhang





## A Spezifikation des Wertebereichs der untersuchten Modellparameter

Für jede untersuchte Fruchtart wurde ein individueller Wertebereich der Parameter zu Grunde gelegt. Im Folgenden werden die in der SA und Parameteroptimierung verwendeten Wertebereiche genau spezifiziert. Tabelle A.1 enthält die Spezifikationen des Wertebereichs von Winterweizen, Wintertriticale, Wintergerste, Winterraps und Sommergerste, Tabelle A.2 die von Sommertriticale, Zuckerrübe, Phacelia, Klee gras und Luzernegrass und Tabelle A.3 die von Mais, Sudangrass, Weidelgras und Hafer. *Min* und *Max* kennzeichnen die Grenzen des Wertebereichs, während *Nom* die Nominalwerte der Parameter beschreibt.

Tabelle A.1: Beschreibung der verwendeten Parameter-Wertebereiche für Winterweizen, Wintertriticale, Wintergerste, Winterraps und Sommergerste.

Parameter	Winterweizen			Wintertriticale			Wintergerste			Winterraps			Sommergerste		
	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom
maxAssimRate	30	70	52	30	70	48	30	70	55	15	90	50	15	45	30
maxCropDiameter	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.004	0.001	0.01	0.006	0.001	0.01	0.004
plantDensity	100	300	220	100	300	220	100	300	220	50	150	100	170	260	220
rootPenRate	0.0008	0.002	0.0011	0.0008	0.002	0.0012	0.0008	0.002	0.0011	0.001	0.004	0.002	0.0008	0.002	0.0011
rootGrowthLag	-60	0	-30	-60	0	-30	-60	0	-30	-60	0	-30	-60	0	-30
initRootingDepth	0.1	0.3	0.1	0.1	0.3	0.1	0.1	0.3	0.1	0.1	0.3	0.1	0.1	0.3	0.1
specMaxRootDepth	0.5	2	1.3	0.5	2	1.4	0.5	2	1.3	0.5	2	1.5	0.8	1.5	1.3
rootFormFactor	1	6	3	1	6	3	1	6	3	0.5	3	1.5	1	6	3
minNConcRoot	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005
NConcRoot	0.001	0.05	0.02	0.001	0.05	0.02	0.001	0.05	0.02	0.001	0.05	0.02	0.001	0.05	0.02
maxNUptakeParam	3	5	3.145	3	5	3.145	3	5	3.145	3	5	3.145	2	5	3.145
minAvailableN	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075
defaultRadUseEff	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
canopyRefCoef	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08
saturationBeta	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5
stomataCondAlpha	30	50	40	30	50	40	30	50	40	30	50	40	30	50	40
stageAtMaxHeight	2	6	3	2	6	3	2	6	3	2	6	3	2	6	3
cropHeightP1	1	10	6	1	10	6.84	9	15	12	5	15	9	0.1	20	12
cropHeightP2	0.1	1	0.5	0.1	1	0.53	0.1	1	0.6	0.1	0.5	0.35	0.1	1	0.6
luxuryNCoeff	1	2	1.3	1	2	1.3	1	2	1.3	1	2	1.1	1	2	1.3
maintRespP1	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.04	0.01	0.2		0.01	0.15	0.08
maintRespP2	30	50	44	30	50	44	30	50	44	30	50	44	30	50	44
growthRespP1	0.07	0.15	0.1	0.07	0.15	0.1	0.07	0.15	0.1	0.07	0.2	0.1	0.07	0.15	0.1
growthRespP2	30	50	38	30	50	38	30	50	38	30	50	38	30	50	38
residueNRatio	0.1	2	0.5	0.1	2	0.5	0.1	0.5	0.3	0.1	2	0.3	0.1	0.5	0.3
minimumNConc	0.0001	0.01	0.005	0.0001	0.01	0.005	0.0001	0.01	0.005	0.0001	0.01	0.005	0.001	0.009	0.005
nConcB0	0	3	2	0	3	2	0	3	2	2	5	3.5	1	3	2.269
nConcPN	1	3	1.6	1	3	1.6	1	3	1.6	1	2	1.35	0.5	2	1.6
specAnaerobDenit	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1
immobRateCoeffNO3	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
immobRateCoeffNH4	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
maxCropNDemand	5	7	6	5	7	6	5	7	6	5	7	6	5	7	6
nitrRateCoeffStand	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1
transportRateCoeff	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1
CNRatioSMB	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7
AOMDryMatterCont	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMNH4Content	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMNO3Content	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMCarbamidCont	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5
partAOM2AOMSlow	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5

	Winterweizen			Wintertriticale			Wintergerste			Winterraps			Sommergerste		
Parameter	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom
partAOM2AOMFast	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5
CNRationAOMSlow	50	150	100	50	150	100	50	150	100	50	150	100	50	150	100
CNRationAOMFast	1	50	25	1	50	25	1	50	25	1	50	25	1	50	25
SOMSlowDecCoeffStand	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5
SOMFastDecCoeffStand	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4
SMBSlowMaintRateStand	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001
SMBFastMaintRateStand	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01
SMBSlowDeathRateStand	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001
SMBFastDeathRateStand	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01
SMBUtilEff	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6
SOMSlowUtilEff	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4
SOMFastUtilEff	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMSlowUtilEff	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4
AOMFastUtilEff	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4
AOMFastMaxC2N	200	2000	1000	200	2000	1000	200	2000	1000	200	2000	1000	200	2000	1000
HydrolysisKM	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3
HydrolysisP1	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12
HydrolysisP2	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12
DiffusionCoefStand	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4
stageTempSum <sub>1</sub>	50	250	148	200	400	300	50	250	108	10	200	130	50	200	108
stageTempSum <sub>2</sub>	200	400	284	500	750	650	200	400	284	150	350	284	200	400	284
stageTempSum <sub>3</sub>	300	500	380	100	300	200	300	500	380	50	250	160	200	450	330
stageTempSum <sub>4</sub>	100	300	200	150	350	250	50	200	120	50	250	160	80	140	120
stageTempSum <sub>5</sub>	300	500	420	200	300	300	100	300	200	700	1100	900	100	300	200
stageTempSum <sub>6</sub>	10	80	25	10	80	25	10	80	25	10	70	25	50	100	25
stageKcFactor <sub>1</sub>	0.1	0.8	0.4	0.01	0.4	0.04	0.1	0.8	0.4	0.2	1	0.6	0.1	0.8	0.4
stageKcFactor <sub>2</sub>	0.3	1.1	0.7	0.3	1.1	0.7	0.3	1.1	0.7	0.7	1.5	1.1	0.4	1.1	0.6
stageKcFactor <sub>3</sub>	0.7	1.5	1.1	0.7	1.5	1	0.7	1.5	1.1	0.7	1.5	1.3	0.7	1.3	1
stageKcFactor <sub>4</sub>	0.7	1.5	1.1	0.7	1.5	1.1	0.7	1.5	1.1	0.7	1.5	1.1	0.7	1.3	1
stageKcFactor <sub>5</sub>	0.5	1.3	0.8	0.5	1.3	0.8	0.5	1.3	0.8	0.5	1.1	0.8	0.6	1.3	0.8
stageKcFactor <sub>6</sub>	0.1	0.5	0.25	0.1	0.5	0.25	0.1	0.5	0.25	0.2	0.9	0.6	0.1	0.5	0.25
droughtStressTresh <sub>1</sub>	0.1	1	1	0.1	1	1	0.1	1	0.8	0.1	1	1	0.1	1	0.8
droughtStressTresh <sub>2</sub>	0.1	1	0.9	0.1	1	0.7	0.1	1	0.8	0.1	1	0.8	0.1	1	0.8
droughtStressTresh <sub>3</sub>	0.1	1	1	0.1	1	0.75	0.1	1	0.8	0.1	1	0.8	0.1	1	0.8
droughtStressTresh <sub>4</sub>	0.1	1	1	0.1	1	0.75	0.1	1	0.75	0.1	1	0.8	0.1	1	0.75
droughtStressTresh <sub>5</sub>	0.1	1	0.9	0.1	1	0.6	0.1	1	0.6	0.1	1	0.8	0.1	1	0.6
droughtStressTresh <sub>6</sub>	0.1	1	0.8	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	1	0.1	1	0.5
VernReq <sub>1</sub>	0.001	100	0	0.001	100	0	0.001	100	0	0.001	100	0			
vernReq <sub>2</sub>	0.001	100	50	0.001	100	50	0.001	100	33	0.001	100	35			
vernReq <sub>3</sub>	0.001	100	0	0.001	100	0	0.001	100	0	0.001	100	0			
daylengthReq <sub>1</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0
daylengthReq <sub>2</sub>	6	20	20	6	20	20	6	20	20	6	20	20	6	20	20
daylengthReq <sub>3</sub>	6	20	20	6	20	20	6	20	20	6	20	20	6	20	20
daylengthReq <sub>4</sub>	6	20	20	6	20	0	6	20	20	6	20	20	6	20	0
daylengthReq <sub>5</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0
daylengthReq <sub>6</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0
specificLeafArea <sub>1</sub>	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>2</sub>	0.001	0.003	0.0018	0.001	0.003	0.0018	0.001	0.003	0.0019	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.0019
specificLeafArea <sub>3</sub>	0.001	0.003	0.0017	0.001	0.003	0.0017	0.001	0.003	0.0018	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.0018
specificLeafArea <sub>4</sub>	0.001	0.003	0.0016	0.001	0.003	0.0016	0.001	0.003	0.0017	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.0017
specificLeafArea <sub>5</sub>	0.001	0.003	0.0015	0.001	0.003	0.0015	0.001	0.003	0.0016	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.0016
specificLeafArea <sub>6</sub>	0.001	0.003	0.0015	0.001	0.003	0.0015	0.001	0.003	0.0016	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.0016
stageMaxRootN <sub>1</sub>	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.001	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02
stageMaxRootN <sub>2</sub>	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.001	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02
stageMaxRootN <sub>3</sub>	0.005	0.04	0.012	0.005	0.04	0.012	0.005	0.04	0.012	0.001	0.04	0.012	0.005	0.3	0.012
stageMaxRootN <sub>4</sub>	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.3	0.01
stageMaxRootN <sub>5</sub>	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.001	0.3	0.01
stageMaxRootN <sub>6</sub>	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.001	0.3	0.01
critOxygenContent <sub>1</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08
critOxygenContent <sub>2</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.04	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.04
critOxygenContent <sub>3</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.04	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.04
critOxygenContent <sub>4</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.04	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.04
critOxygenContent <sub>5</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.04	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.04
critOxygenContent <sub>6</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.04	0.01	0.1	0.03	0.01	0.1	0.04

Tabelle A.2: Beschreibung der verwendeten Parameter-Wertebereiche für Sommertriticale, Zuckerrübe, Phacelia, Klee-gras und Luzernegrass.

	Sommertriticale			Zuckerrübe			Phacelia			Klee-gras			Luzernegrass		
Parameter	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom
maxAssimRate	30	70	45	70	120	100	20	60	45	15	70	45	5	30	13
maxCropDiameter	0.001	0.01	0.005	0.001	0.1	0	0.002	0.008	0.006	0.001	0.007	0.003	0.001	0.007	0.003
plantDensity	170	260	220	6.00E+000	10	8	400	800	600	300	700	600	300	700	600
rootPenRate	0.0008	0.002	0.0012	0.0008	0.0014	0.0011	0.001	0.003	0.002	0.0006	0.002	0.0008	0.0006	0.001	0.0008
rootGrowthLag	-60	0	-30	-80	-40	-60	-60	0	-30	-60	0	-30	-60	0	-30
initRootingDepth	0.1	0.3	0.1	0.01	0.3	0.06	0.1	0.3	0.1	0.1	0.3	0.1	0.1	0.3	0.1
specMaxRootDepth	0.8	1.7	1.4	0.5	2	1.6	0.7	1.5	1.2	0.1	0.6	0.3	0.1	0.6	0.3
rootFormFactor	1	6	3	1	6	2	4	6	5	4	6	5	4	6	5
minNConcRoot	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005
NConcRoot	0.001	0.05	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.05	0.02	0.01	0.05	0.02	0.01	0.05	0.02
maxNUptakeParam	2	5	3.145	3	8	5.645	2	5	3.145	2	5	3.145	2	5	3.145
minAvailableN	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075
defaultRadUseEff	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
canopyRefCoef	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08
saturationBeta	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5
stomataCondAlpha	30	50	40	30	50	40	30	50	40	30	50	40	30	50	40
stageAtMaxHeight	2	6	3	2	4	3	2	6	3	2	6	3	2	6	3
cropHeightP1	0.1	20	12	5	14	9	5	15	9	5	15	9	5	15	9
cropHeightP2	0.1	1	0.55	0.1	0.5	0.35	0.1	0.5	0.35	0.1	0.5	0.35	0.1	0.5	0.1
luxuryNCoeff	1	2	1.3	1	2	1.65	1	2	1.5	1	2	1	1	2	1
maintRespP1	0.01	0.15	0.08	0.01	0.15	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.1	0.08
maintRespP2	30	50	44	30	50	44	30	50	44	30	50	44	30	50	44
growthRespP1	0.07	0.15	0.1	0.07	0.15	0.1	0.07	0.2	0.1	0.07	0.2	0.1	0.07	0.2	0.1
growthRespP2	30	50	38	30	50	38	30	50	38	30	50	38	30	50	38
residueNRatio	0.3	0.7	0.5	1	3	2	0.1	2	1	0.1	2	1	0.1	2	1
minimumNConc	0.001	0.009	0.005	0.001	0.008	0.004	0.001	0.01	0.005	0.0001	0.01	0.005	0.0001	0.01	0.005
nConcB0	1	3	2	0.5	3	1.38	1.5	3.5	2.5	0	3	0	0	3	0
nConcPN	0.5	2	1.6	0.1	3	1.11	1.5	3.5	2.5	1	5	2.6	0.1	3	0.224
specAnaerobDenit	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1
immobRateCoeffNO3	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
immobRateCoeffNH4	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
maxCropNDemand	5	7	6	5	7	6	5	7	6	5	7	6	5	7	6
nitrRateCoeffStand	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1
transportRateCoeff	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1
CNRatioSMB	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7
AOMDryMatterCont	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMNH4Content	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMNO3Content	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMCarbamidCont	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5
partAOM2AOMSlow	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5
partAOM2AOMFast	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5
CNRationAOMSlow	50	150	100	50	150	100	50	150	100	50	150	100	50	150	100
CNRationAOMFast	1	50	25	1	50	25	1	50	25	1	50	25	1	50	25
SOMSlowDecCoeffStand	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5
SOMFastDecCoeffStand	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4
SMBSlowMaintRateStand	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001
SMBFastMaintRateStand	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01
SMBSlowDeathRateStand	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001
SMBFastDeathRateStand	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01
SMBUtilEff	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6
SOMSlowUtilEff	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4
SOMFastUtilEff	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMSlowUtilEff	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4
AOMFastUtilEff	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4
AOMFastMaxC2N	200	2000	1000	200	2000	1000	200	2000	1000	200	2000	1000	200	2000	1000
HydrolysisKM	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3
HydrolysisP1	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12
HydrolysisP2	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12
DiffusionCoefStand	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4

	Sommertriticale			Zuckerrübe			Phacelia			Klee gras			Luzerne gras		
Parameter	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom
stageTempSum <sub>1</sub>	100	250	150	10	200	100	5	60	40	10	100	40	10	100	40
stageTempSum <sub>2</sub>	100	300	200	200	400	300	150	350	284	150	350	284	150	350	284
stageTempSum <sub>3</sub>	300	500	400	400	700	565	250	450	200	100	300	200	100	300	200
stageTempSum <sub>4</sub>	250	450	350	450	750	608	300	500	400	300	500	400	300	500	400
stageTempSum <sub>5</sub>	200	400	300	1200	1800	1600	250	450	350	250	450	350	250	450	350
stageTempSum <sub>6</sub>	10	70	25	10	100	25	10	70	25	10	70	25	10	70	25
stageKcFactor <sub>1</sub>	0.05	0.4	0.1	0.1	1.5	0.4	0.3	0.8	0.6	0.3	1	0.6	0.1	0.5	0.3
stageKcFactor <sub>2</sub>	0.1	0.7	0.3	0.1	1.5	0.8	0.5	1.5	0.95	0.5	1.5	0.9	0.5	1.5	1.0
stageKcFactor <sub>3</sub>	0.3	0.9	0.6	0.1	1.5	1	0.7	1.5	1	0.5	1.5	0.93	0.7	1.5	1.1
stageKcFactor <sub>4</sub>	0.4	1	0.7	0.1	1.5	1.35	0.7	1.5	1	0.5	1.5	0.93	0.7	1.5	1.1
stageKcFactor <sub>5</sub>	0.4	1	0.7	0.1	1.5	0.85	0.7	1.5	1	0.5	1.5	0.93	0.7	1.5	1.1
stageKcFactor <sub>6</sub>	0.1	0.5	0.25	0.1	1	0.4	0.7	1.5	0.8	0.5	1.5	0.8	0.7	1.5	1
droughtStressTresh <sub>1</sub>	0.1	1	0	0.1	1	1	0.1	1	1	0.1	1	1	0.1	1	1
droughtStressTresh <sub>2</sub>	0.1	1	0	0.1	1	0.7	0.1	1	1	0.1	1	1	0.1	1	1
droughtStressTresh <sub>3</sub>	0.1	1	0	0.1	1	0.8	0.1	1	1	0.1	1	1	0.1	1	1
droughtStressTresh <sub>4</sub>	0.1	1	0	0.1	1	0.8	0.1	1	1	0.1	1	1	0.1	1	1
droughtStressTresh <sub>5</sub>	0.1	1	0	0.1	1	0.8	0.1	1	1	0.1	1	1	0.1	1	1
droughtStressTresh <sub>6</sub>	0.1	1	0	0.1	1	0.7	0.1	1	1	0.1	1	1	0.1	1	1
vernReq <sub>1</sub>							10	100	35	10	100	35	10	100	35
vernReq <sub>2</sub>							10	100	35	10	100	35	10	100	35
vernReq <sub>3</sub>							10	100	0	10	100	0	10	100	0
daylengthReq <sub>1</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0
daylengthReq <sub>2</sub>	6	20	20	6	20	0	6	20	20	6	20	20	6	20	20
daylengthReq <sub>3</sub>	6	20	20	6	20	0	6	20	20	6	20	20	6	20	20
daylengthReq <sub>4</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	20	6	20	20	6	20	20
daylengthReq <sub>5</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0
daylengthReq <sub>6</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0
specificLeafArea <sub>1</sub>	0.001	0.003	0.002	0.0005	0.001	0.0009	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>2</sub>	0.001	0.003	0.0018	0.0005	0.002	0.001	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>3</sub>	0.001	0.003	0.0017	0.0005	0.002	0.001	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>4</sub>	0.001	0.003	0.0016	0.0005	0.003	0.0009	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>5</sub>	0.001	0.003	0.0015	0.0005	0.003	0.0009	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>6</sub>	0.001	0.003	0.0015	0.0005	0.003	0.0009	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
stageMaxRootN <sub>1</sub>	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02
stageMaxRootN <sub>2</sub>	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.015	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02
stageMaxRootN <sub>3</sub>	0.005	0.3	0.012	0.01	0.04	0.012	0.005	0.04	0.012	0.005	0.04	0.012	0.005	0.04	0.012
stageMaxRootN <sub>4</sub>	0.005	0.3	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.04	0.01	0.005	0.04	0.01	0.005	0.04	0.01
stageMaxRootN <sub>5</sub>	0.001	0.3	0.01	0.005	0.04	0.009	0.005	0.04	0.01	0.005	0.04	0.01	0.005	0.04	0.01
stageMaxRootN <sub>6</sub>	0.001	0.3	0.01	0.005	0.04	0.009	0.005	0.04	0.01	0.05	0.04	0.01	0.005	0.04	0.01
critOxygenContent <sub>1</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.05	0.03	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08
critOxygenContent <sub>2</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.05	0.03	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08
critOxygenContent <sub>3</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.05	0.03	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08
critOxygenContent <sub>4</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.05	0.03	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08
critOxygenContent <sub>5</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.05	0.03	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08
critOxygenContent <sub>6</sub>	0.01	0.1	0.08	0.01	0.05	0.03	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08	0.01	0.2	0.08

Tabelle A.3: Beschreibung der verwendeten Parameter-Wertebereiche für Mais, Sudangras, Weidelgras und Hafer.

	Mais			Sudangras			Weidelgras			Hafer		
Parameter	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom
maxAssimRate	70	120	96	100	140	120	5	30	15.3	20	60	39
maxCropDiameter	0.001	0.05	0.025	0.01	0.05	0.025	0.001	0.007	0.003	0.001	0.01	0.004
plantDensity	3	20	10	5	15	10	300	700	600	170	260	220
rootPenRate	0.0008	0.002	0.0014	0.0008	0.002	0.0014	0.0006	0.001	0.0008	0.0008	0.002	0.0011
rootGrowthLag	-60	0	-30	-60	0	-30	-60	0	-30	-60	0	-30
initRootingDepth	0.1	0.3	0.1	0.1	0.3	0.1	0.1	0.3	0.1	0.1	0.3	0.1
specMaxRootDepth	0.5	2	1.4	0.8	2	1.4	0.1	0.6	0.3	0.8	1.6	1.4
rootFormFactor	2	5	3	2	4	3	4	6	5	1	6	3
minNConcRoot	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005	0.001	0.01	0.005
NConcRoot	0.01	0.05	0.02	0.01	0.05	0.02	0.01	0.05	0.02	0.001	0.05	0.02
maxNUptakeParam	3	10	7.4	3	10	7.4	2	5	3.145	2	5	3.145
minAvailableN	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075	0.0004	0.0009	0.00075
defaultRadUseEff	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
canopyRefCoeff	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08	0.05	0.1	0.08
saturationBeta	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5	1.5	4	2.5
stomataCondAlpha	30	50	40	30	50	40	30	50	40	30	50	40
stageAtMaxHeight	2	6	4	3	6	4	2	6	3	2	6	3
cropHeightP1	6	15	9	6	15	9	5	15	9.098	1	10	3.74
cropHeightP2	0.1	0.6	0.35	0.1	0.6	0.35	0.1	0.5	0.194	0.1	1	0.55
luxuryNCoeff	0.5	1.5	1	0.5	1.5	1	1	2	1	1	2	1.2
maintRespP1	0.01	0.15	0.08	0.01	0.15	0.08	0.01	0.1	0.08	0.01	0.15	0.08
maintRespP2	30	50	44	30	50	44	30	50	44	30	50	44
growthRespP1	0.07	0.2	0.1	0.07	0.2	0.1	0.07	0.2	0.1	0.07	0.15	0.1
growthRespP2	30	50	38	30	50	38	30	50	38	30	50	38
residueNRatio	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	2	1	0.1	0.5	0.3
minimumNConc	0.001	0.01	0.004	0.001	0.008	0.004	0.001	0.01	0.005	0.001	0.009	0.005
nConcB0	1	8	5	3	5	4.141	0	2	0.001	1	3	1.963
nConcPN	0.2	1.5	1	0.5	3	2	0.1	4	2.6	0.5	3	2
specAnaerobDenit	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1
immobRateCoeffNO3	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
immobRateCoeffNH4	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
maxCropNDemand	5	7	6	5	7	6	5	7	6	5	7	6
nitrRateCoeffStand	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1	0.05	0.15	0.1
transportRateCoeff	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1	0.01	0.2	0.1
CNRatioSMB	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7	6.4	7	6.7
AOMDryMatterCont	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMNH4Content	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMNO3Content	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMCarbamidCont	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5
partAOM2AOMSlow	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5
partAOM2AOMFast	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5	0.1	1	0.5
CNRationAOMSlow	50	150	100	50	150	100	50	150	100	50	150	100
CNRationAOMFast	1	50	25	1	50	25	1	50	25	1	50	25
SOMSlowDecCoeffStand	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5	3.3e-5	5.3e-5	4.3e-5
SOMFastDecCoeffStand	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4	1.2e-4	1.6e-4	1.4e-4
SMBSlowMaintRateStand	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001
SMBFastMaintRateStand	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.02	0.01
SMBSlowDeathRateStand	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001	0.0007	0.0013	0.001
SMBFastDeathRateStand	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01	0.001	0.1	0.01
SMBUtilEff	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6	0.5	0.7	0.6
SOMSlowUtilEff	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4	0.001	1	0.4
SOMFastUtilEff	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5	0.4	0.6	0.5
AOMSlowUtilEff	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4	0.35	0.45	0.4
AOMFastUtilEff	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4	0.3	0.5	0.4
AOMFastMaxC2N	200	2000	1000	200	2000	1000	200	2000	1000	200	2000	1000
HydrolysisKM	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3	0.001	0.1	3.3e-3
HydrolysisP1	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12	3.3e-12	5.3e-12	4.3e-12
HydrolysisP2	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12	4.1e-13	2.4e-12	1.4e-12
DiffusionCoeffStand	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4	0.0001	0.001	2.1e-4
stageTempSumI	10	150	68	10	100	51	5	60	10	50	200	100

	Mais			Sudangras			Weidelgras			Hafer		
Parameter	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom	Min	Max	Nom
stageTempSum <sub>2</sub>	200	400	284	200	400	213	150	350	281	200	400	300
stageTempSum <sub>3</sub>	100	300	190	50	200	130	250	450	340	300	500	420
stageTempSum <sub>4</sub>	150	350	250	50	200	108	300	500	400	100	300	200
stageTempSum <sub>5</sub>	100	300	200	100	300	223	250	450	350	100	300	200
stageTempSum <sub>6</sub>	300	500	400	50	200	115	10	70	25	50	100	25
StageTempSum <sub>7</sub>	10	100	25	5	70	25						
stageKcFactor <sub>1</sub>	0.1	0.8	0.4	0.1	0.6	0.3	0.3	0.8	0.6	0.1	0.8	0.42
stageKcFactor <sub>2</sub>	0.5	1.5	1	0.5	1.5	0.8	0.5	1.5	0.9	0.4	1.1	0.7
stageKcFactor <sub>3</sub>	0.5	1.5	1	0.5	1.1	0.8	0.7	1.5	0.93	0.7	1.3	0.9
stageKcFactor <sub>4</sub>	0.5	1.5	1.2	0.7	1.3	0.97	0.7	1.5	0.93	0.7	1.3	0.9
stageKcFactor <sub>5</sub>	0.5	1.5	1.25	0.7	1.3	0.97	0.7	1.5	0.93	0.6	1	0.61
stageKcFactor <sub>6</sub>	0.5	1.5	1.25	0.7	1.3	0.9	0.7	1.5	0.8	0.1	0.5	0.25
StageKcFactor <sub>7</sub>	0.5	1.5	1	0.5	1.3	0.8						
droughtStressTresh <sub>1</sub>	0.1	1	0.5	0.1	1	0	0.1	1	1	0.1	1	1
droughtStressTresh <sub>2</sub>	0.1	1	0.5	0.1	1	0	0.1	1	1	0.1	1	0.7
droughtStressTresh <sub>3</sub>	0.1	1	0.5	0.1	1	0	0.1	1	1	0.1	1	0.75
droughtStressTresh <sub>4</sub>	0.1	1	0.5	0.1	1	0	0.1	1	1	0.1	1	0.75
droughtStressTresh <sub>5</sub>	0.1	1	0.6	0.1	1	0	0.1	1	1	0.1	1	0.6
DroughtStressTresh <sub>6</sub>	0.1	1	0.6	0.1	1	0	0.1	1	1	0.1	1	0.5
DroughtStressTresh <sub>7</sub>	0.1	0.4	0.2	0.1	0.4	0						
VernReq <sub>1</sub>							10	100	0			
vernReq <sub>2</sub>							10	100	0			
vernReq <sub>3</sub>							10	100	0			
daylengthReq <sub>1</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0
daylengthReq <sub>2</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	20
daylengthReq <sub>3</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	20
daylengthReq <sub>4</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	20
daylengthReq <sub>5</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0
daylengthReq <sub>6</sub>	6	20	0	6	20	0	6	20	0	6	20	0
DaylengthReq <sub>7</sub>	6	20	0	6	20	0						
specificLeafArea <sub>1</sub>	0.001	0.003	0.0025	0.001	0.003	0.0025	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>2</sub>	0.001	0.003	0.0017	0.001	0.003	0.0017	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>3</sub>	0.001	0.003	0.0015	0.001	0.003	0.0015	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>4</sub>	0.001	0.003	0.0014	0.001	0.003	0.0014	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>5</sub>	0.001	0.003	0.0012	0.001	0.003	0.0012	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
specificLeafArea <sub>6</sub>	0.001	0.003	0.0012	0.001	0.003	0.0012	0.001	0.003	0.002	0.001	0.003	0.002
SpecificLeafArea <sub>7</sub>	0.001	0.003	0.0012	0.001	0.003	0.0012						
stageMaxRootN <sub>1</sub>	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02
stageMaxRootN <sub>2</sub>	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02	0.01	0.04	0.02
stageMaxRootN <sub>3</sub>	0.01	0.04	0.012	0.005	0.02	0.012	0.005	0.04	0.012	0.005	0.3	0.012
stageMaxRootN <sub>4</sub>	0.01	0.04	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.04	0.01	0.005	0.3	0.01
stageMaxRootN <sub>5</sub>	0.01	0.04	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.04	0.01	0.001	0.3	0.01
stageMaxRootN <sub>6</sub>	0.01	0.04	0.01	0.005	0.02	0.01	0.005	0.04	0.01	0.001	0.3	0.01
StageMaxRootN <sub>7</sub>	0.01	0.04	0.01	0.005	0.02	0.01						
critOxygenContent <sub>1</sub>	0.01	0.08	0.04	0.01	0.08	0.04	0.01	0.2	0.08	0.01	0.1	0.08
critOxygenContent <sub>2</sub>	0.008	0.08	0.02	0.008	0.08	0.02	0.01	0.2	0.08	0.01	0.1	0.08
critOxygenContent <sub>3</sub>	0.008	0.08	0.02	0.008	0.08	0.02	0.01	0.2	0.08	0.01	0.1	0.08
critOxygenContent <sub>4</sub>	0.008	0.08	0.02	0.008	0.08	0.02	0.01	0.2	0.08	0.01	0.1	0.08
critOxygenContent <sub>5</sub>	0.008	0.08	0.02	0.008	0.08	0.02	0.01	0.2	0.08	0.01	0.1	0.08
critOxygenContent <sub>6</sub>	0.008	0.08	0.02	0.008	0.08	0.02	0.01	0.2	0.08	0.01	0.1	0.08
CritOxygenContent <sub>7</sub>	0.01	0.08	0.04	0.01	0.08	0.04						

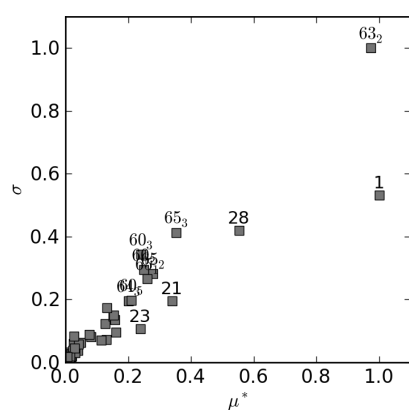
## B Weitere Abbildungen zu den SA - Ergebnissen

### SA für verschiedene Fruchtarten

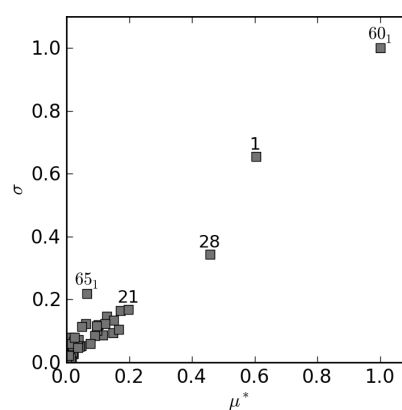
In diesem Abschnitt sind der Vollständigkeit halber die kompletten Ergebnisse – sowohl vom Morris-Screening als auch der Extended FAST – dargestellt.

#### Ergebnisse des Morris-Screenings

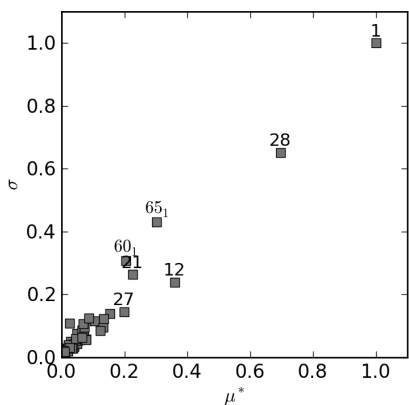
Abbildung A.1 enthält die Darstellung der vollständigen Ergebnisse des Morris-Screenings. Es erfolgte eine Gegenüberstellung von  $\mu^*$  und  $\sigma$  der untersuchten Fruchtarten. Die Modellparameter sind durch ihre entsprechende Nummer gekennzeichnet (Tabelle 5.1). Das resultierende Parameter-Ranking ist in Tabelle 5.4 enthalten.



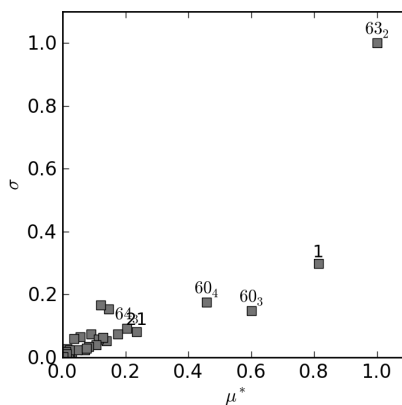
(a) Winterweizen



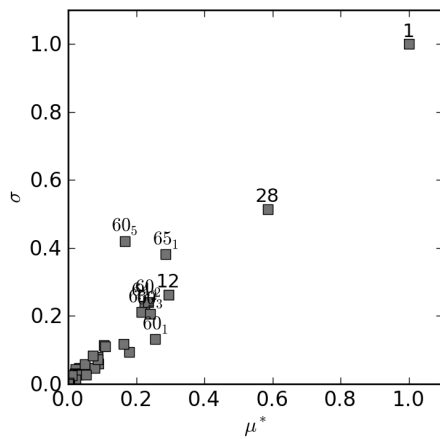
(b) Wintertriticale



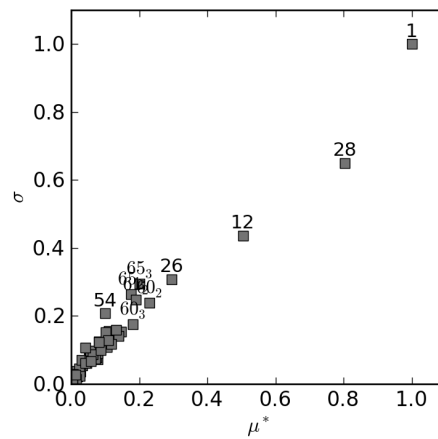
(c) Wintergerste



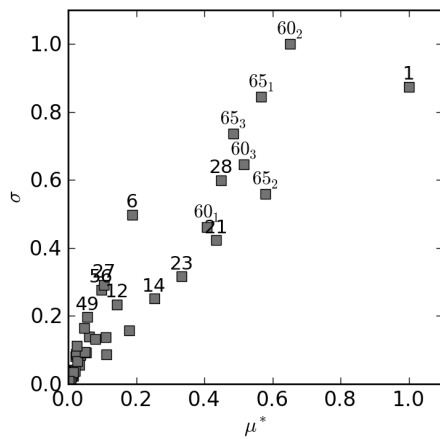
(d) Winterraps



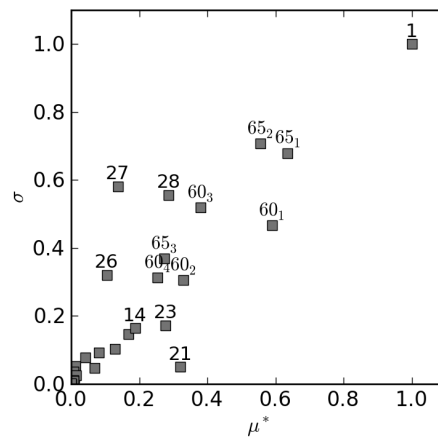
(e) Sommergerste



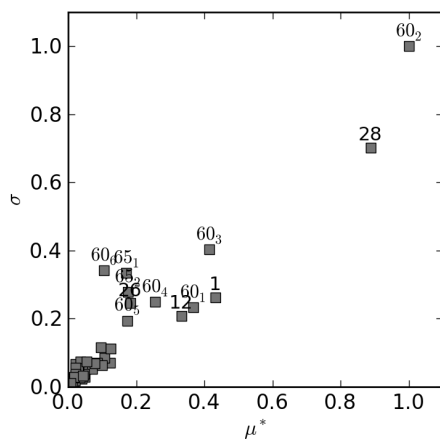
(f) Sommertriticale



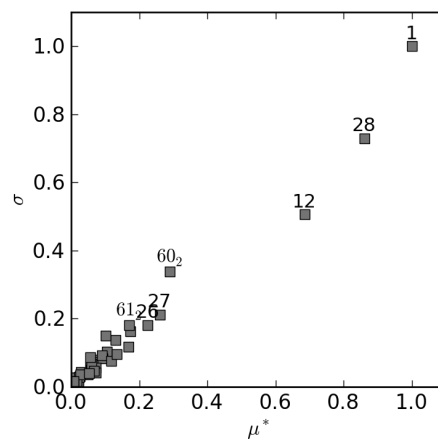
(g) Zuckerrübe



(h) Mais



(i) Sudangras



(j) Phacelia



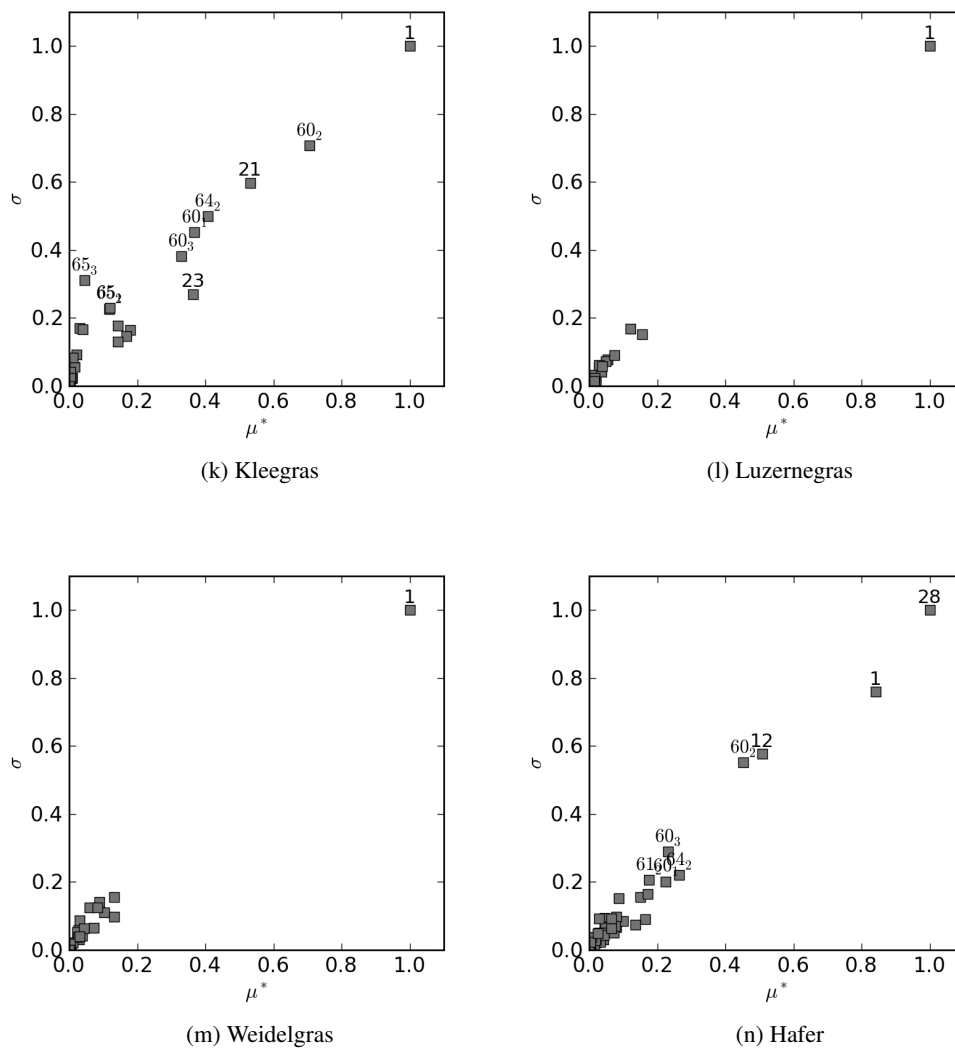
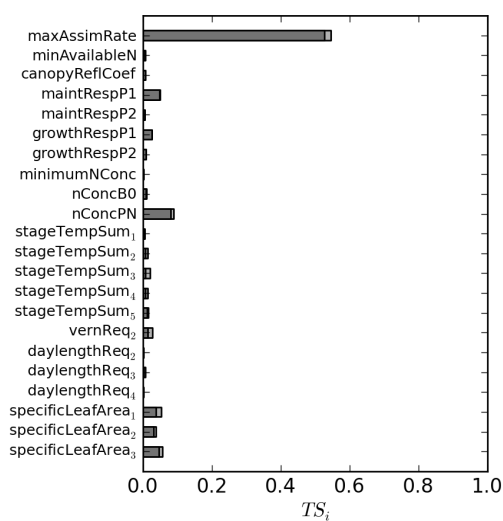


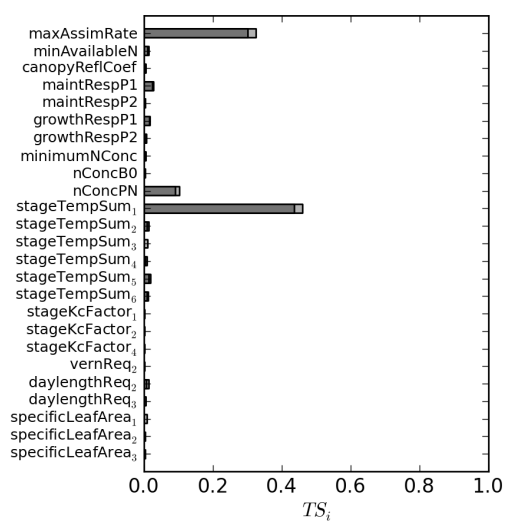
Abbildung A.1: Vollständige Ergebnisse des Morris-Screenings.

## Ergebnisse der Extended FAST

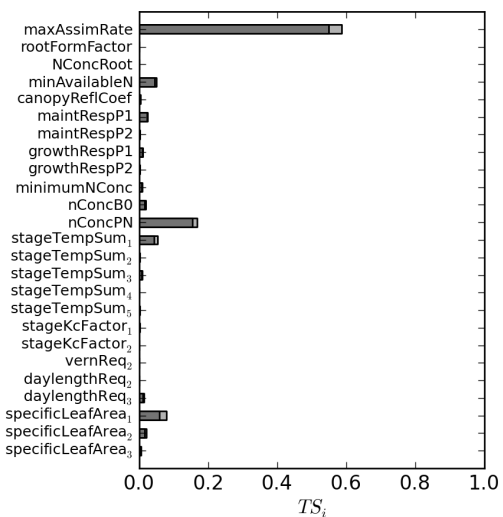
Abbildung A.2 enthält eine vollständige Darstellung der Ergebnisse der Extended FAST für alle untersuchten Fruchtarten. Es erfolgte die Quantifizierung der Haupt- und Totaleffekte der analysierten Modellparameter für jede untersuchte Fruchtart. Eine Beschreibung der untersuchten Modellparameter befindet sich in Tabelle 5.1. Die für jede Fruchtart individuell konfigurierten Wertebereiche sind in den Tabellen A.1 - A.1 nachzulesen.



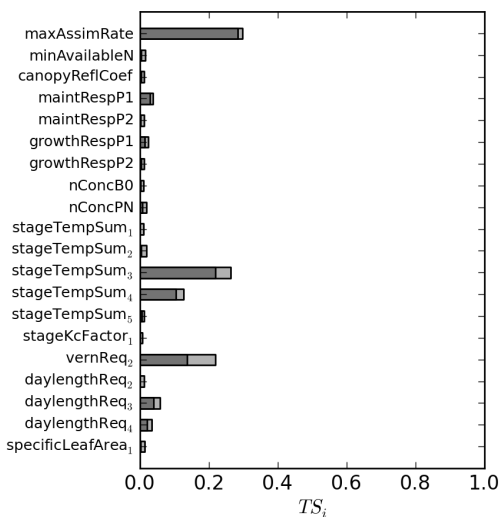
(a) Winterweizen



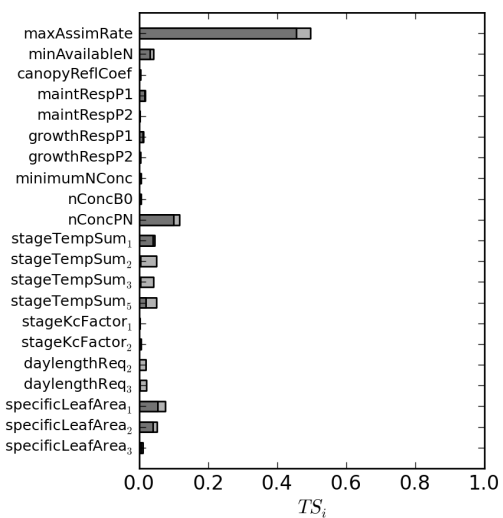
(b) Wintertriticale



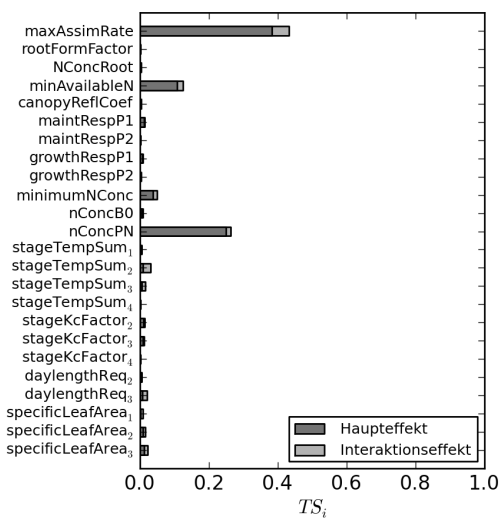
(c) Wintergerste



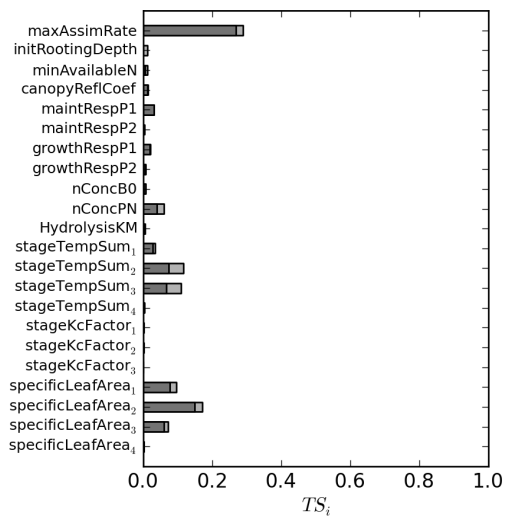
(d) Winterraps



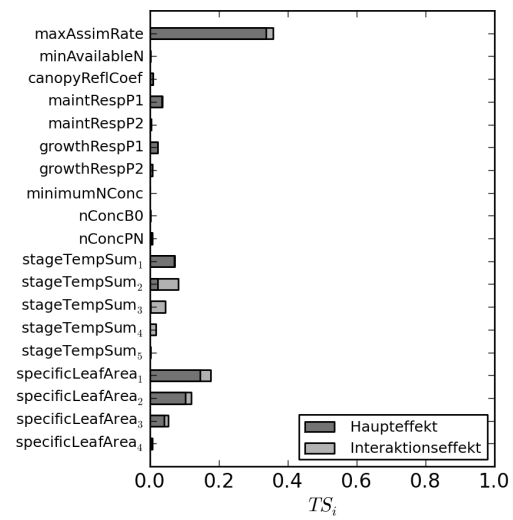
(e) Sommergerste



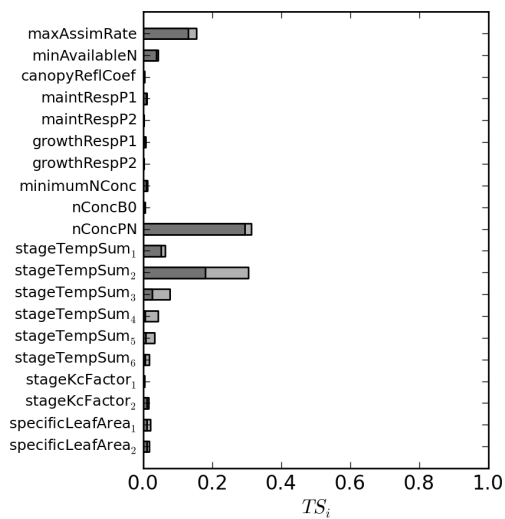
(f) Sommertriticale



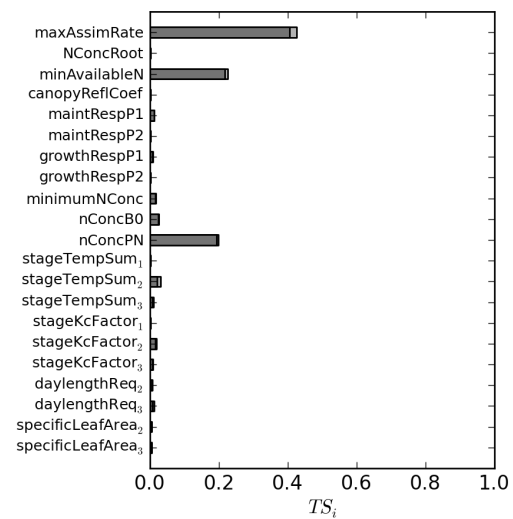
(g) Zuckerrübe



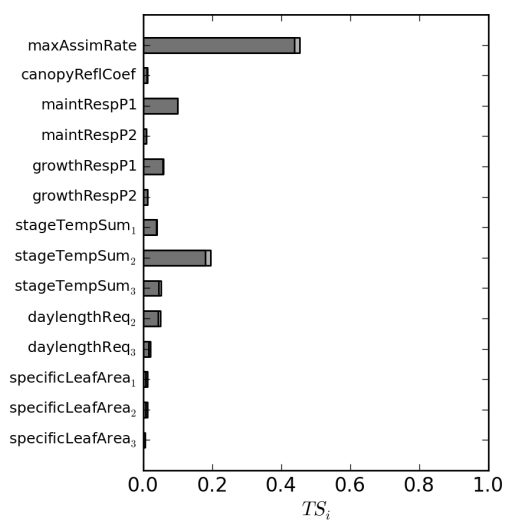
(h) Mais



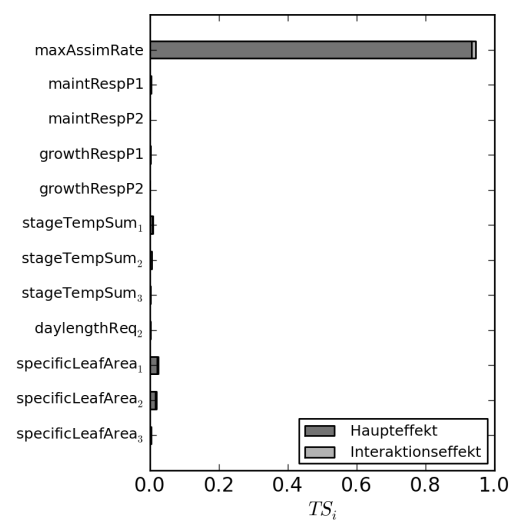
(i) Sudangras



(j) Phacelia



(k) Klee gras



(l) Luzernegras

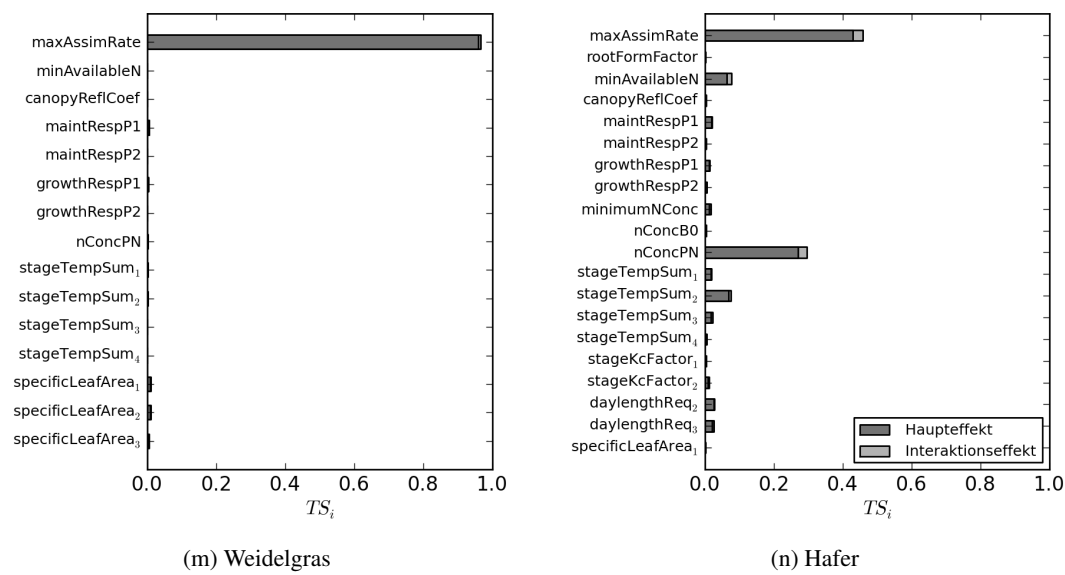


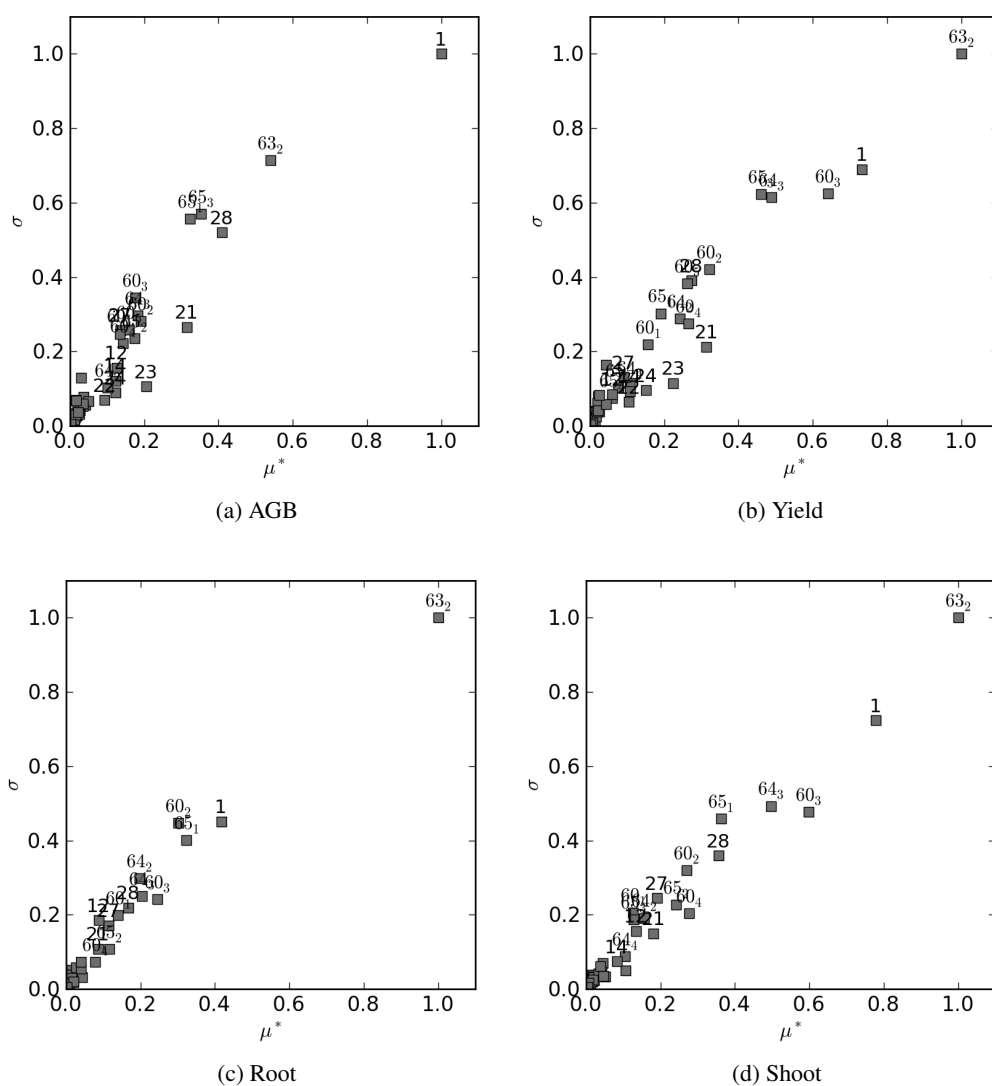
Abbildung A.2: Vollständige Ergebnisse der Extended FAST für jede untersuchte Fruchtart.

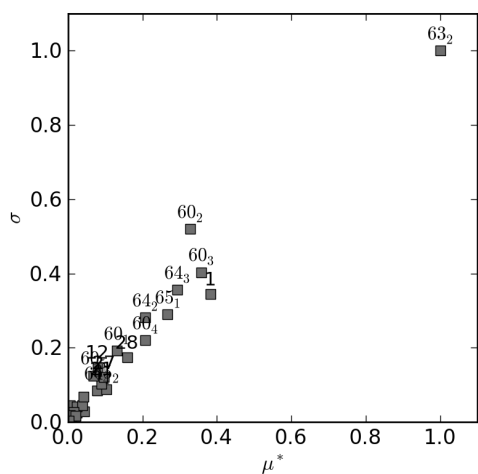
## SA für verschiedene Outputs

In diesem Abschnitt sind der Vollständigkeit halber die kompletten Ergebnisse – sowohl vom Morris-Screening als auch der Extended FAST – dargestellt.

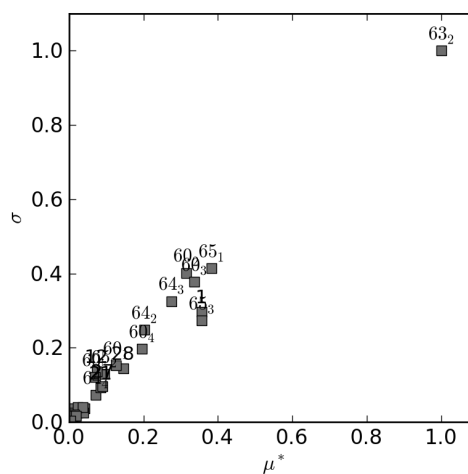
### Ergebnisse des Morris-Screenings

Abbildung A.3 enthält eine Darstellung der vollständigen Ergebnisse des Morris-Screenings der untersuchten Modelloutputs. Modellparameter sind durch ihre entsprechende Nummer gekennzeichnet (Tabelle 5.1). Das resultierende Parameter-Ranking befindet sich in Tabelle 5.9.

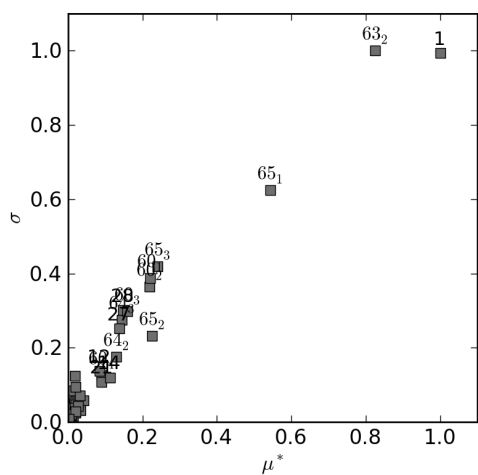




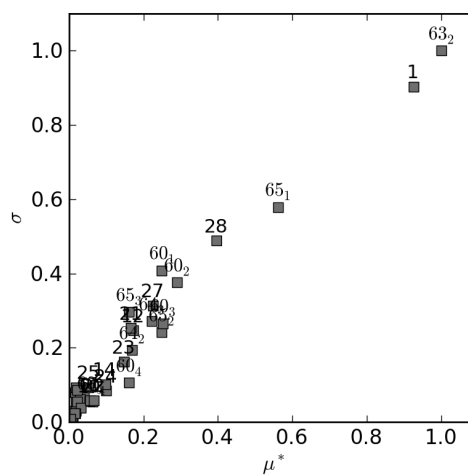
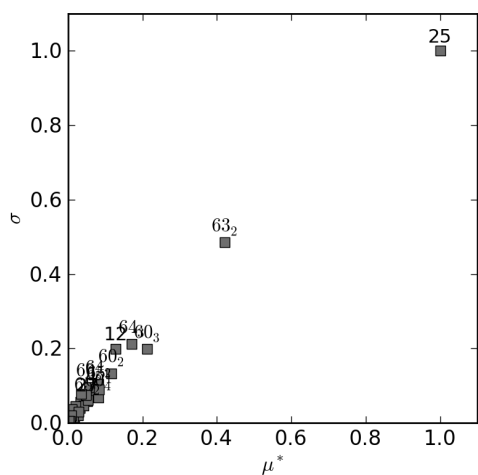
(e) Leaf



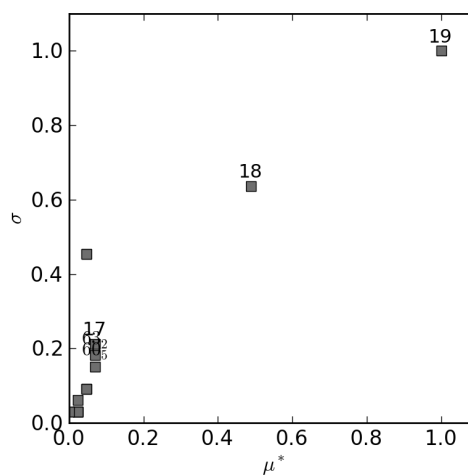
(f) LAI



(g) GPP

(h)  $R_d$ 

(i) Nconc



(j) Height

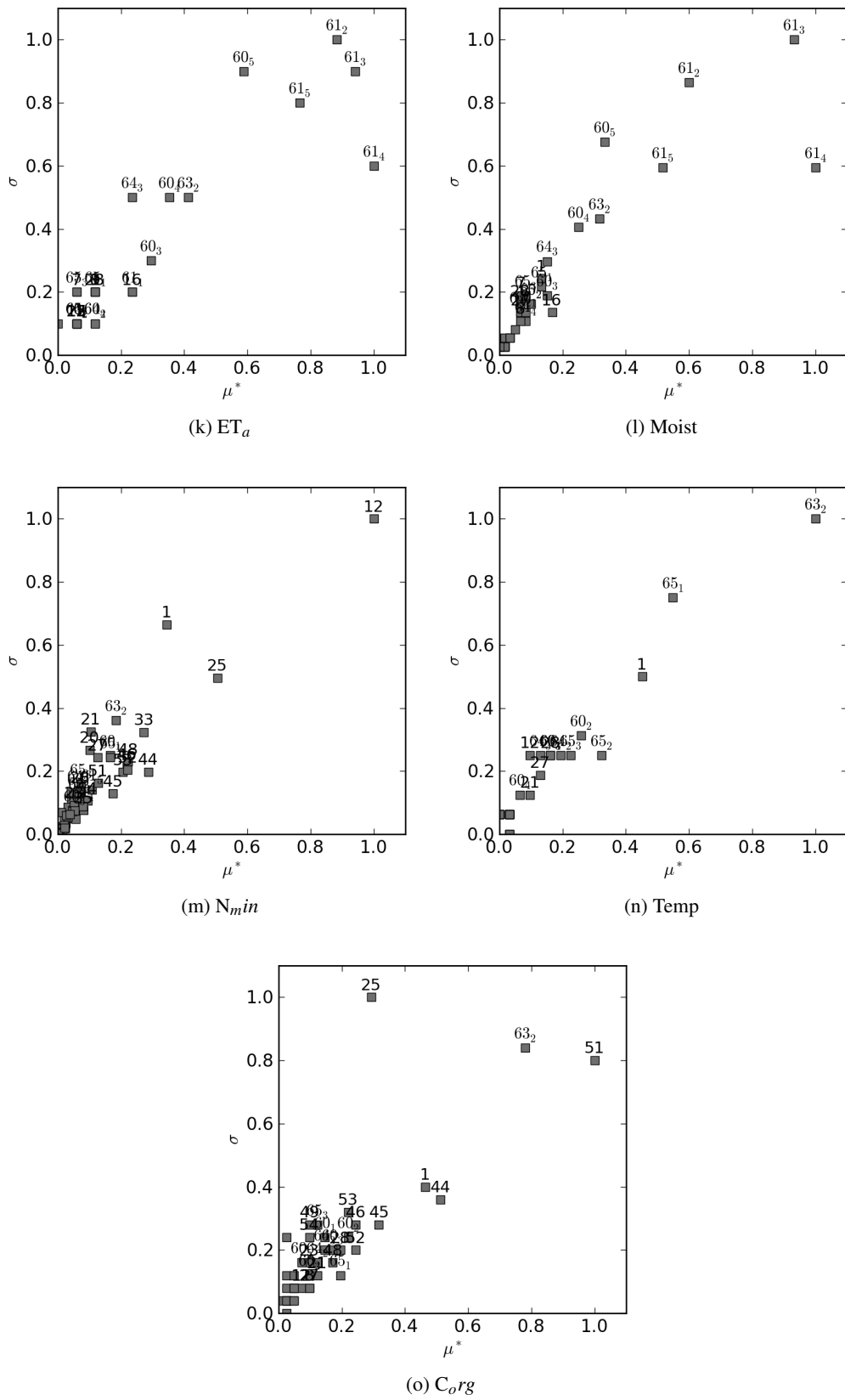
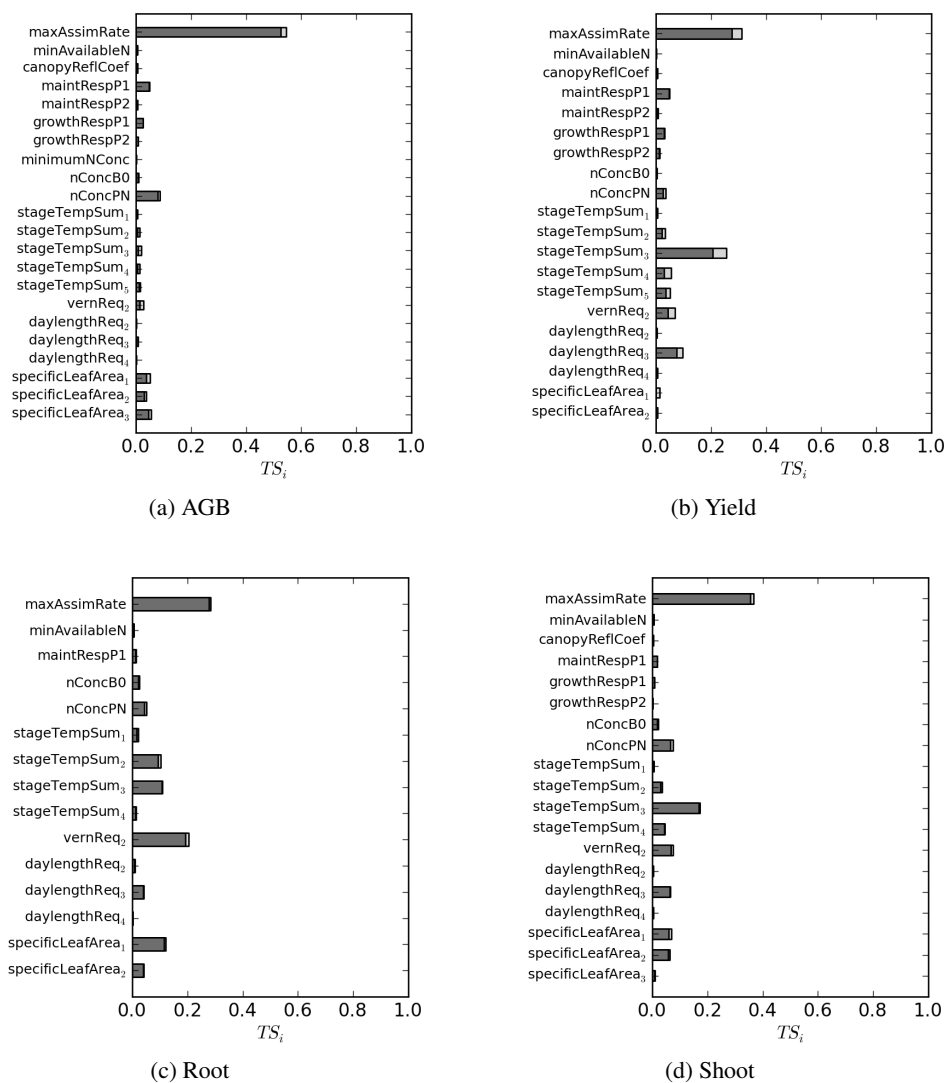


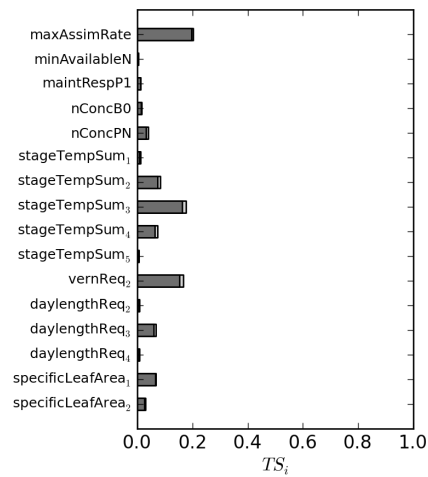
Abbildung A.3: Ergebnisse des Morris-Screenings. Gegenüberstellung von  $\mu^*$  und  $\sigma$  der untersuchten Modelloutputs.

## Ergebnisse der Extended FAST

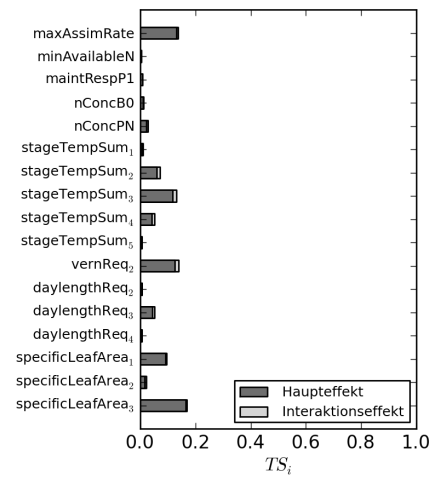
Abbildung A.4 enthält eine vollständige Darstellung der Ergebnisse der Extended FAST für verschiedene Modelloutputs am Beispiel von Winterweizen. Quantifizierung der Haupt- und Total-effekte der untersuchten Modellparameter. Eine Beschreibung der untersuchten Modellparameter befindet sich in Tabelle 5.1. Die untersuchten Wertebereiche sind in den Tabellen A.1 - A.1 zu finden.



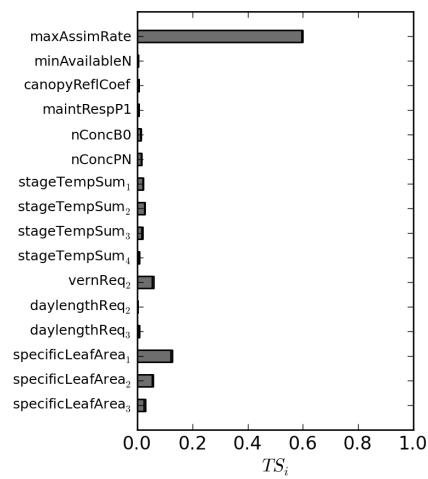




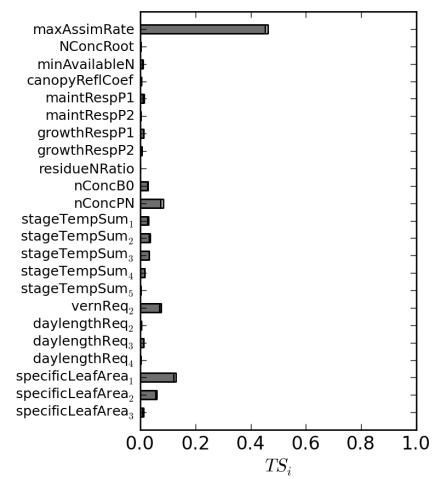
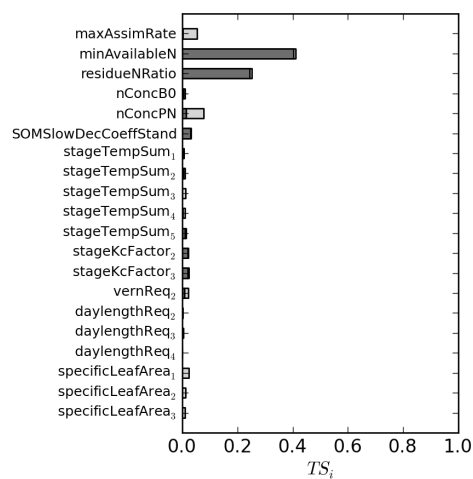
(e) Leaf



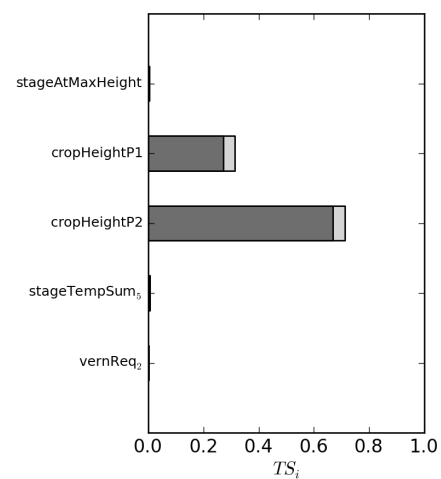
(f) LAI



(g) GPP

(h)  $R_d$ 

(i) NConc



(j) Height

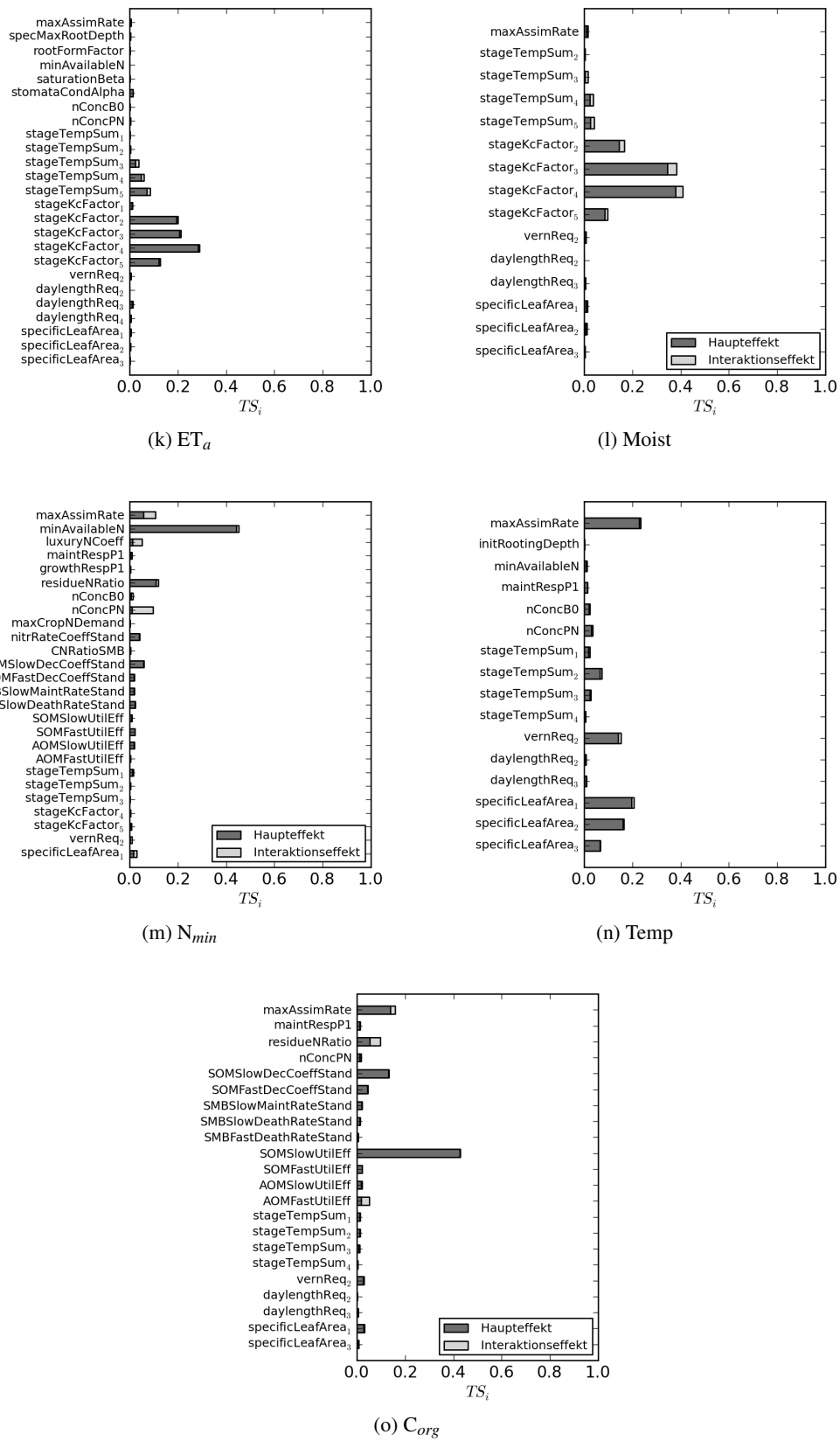


Abbildung A.4: Vollständige Ergebnisse der Extended FAST für verschiedene Modelloutputs am Beispiel von Winterweizen.





# Lebenslauf von Xenia Specka (geb. Holtmann)

---

## Persönliche Angaben

Geburt	17. Februar 1981, Neubrandenburg
Familienstand	verheiratet

---

## Berufserfahrung

seit 05/2009	Leibniz-Zentrum für Agrarlandschaftsforschung (ZALF), Müncheberg, Wissenschaftliche Mitarbeiterin
06/2006–11/2008	BRAVIS GmbH, Cottbus, Software-Entwicklerin und Projektmanagerin
01/2006–02/2006	ZALF, Müncheberg, Wissenschaftliche Mitarbeiterin

---

## Praktika

08/2004–09/2004	EAWAG, Zürich, 'Entwicklung eines Fuzzy-Bewertungsmoduls für das Simulationsprogramm SIMBOX'
08/2004–09/2004	ZALF, Müncheberg, Praktikumssemester, 'Entwicklung eines objektorientierten Werkzeugs zur Erstellung und Analyse von Fuzzy-Modellen'

---

## Ausbildung

10/2000–12/2005	Technische Universität Ilmenau, Diplom-Studiengang Informatik
09/1993–06/2000	Theodor-Fontane-Gymnasium, Strausberg, Abschluss: Allgemeine Hochschulreife



# Danksagung

Eine wissenschaftliche Arbeit ist nie das Werk einer einzelnen Person. Deshalb möchte ich mich an dieser Stelle bei allen Menschen, die mich beim Erstellen meiner Dissertation unterstützt haben, bedanken.

Besonderer Dank gilt meinen Referenten Prof. Dr. Albrecht Gnauck, Prof. Dr. Florian Jeltsch und Prof. Dr. Karl-Otto Wenkel für die Begutachtung dieser Arbeit.

Ich möchte mich weiterhin für die große Unterstützung meiner beiden Betreuer am Institut für Landschaftssystemanalyse (ZALF), Dr. Ralf Wieland und Dr. Claas Nendel, bedanken. Besonderer Dank gilt dabei Claas, der mir in zahlreichen Privatvorlesungen umfangreiches Wissen aus der Agrarwissenschaft und aus anderen ökologischen Themen vermittelt hat. Ohne ihn wäre mir der Übergang von einer reinen Informatikerin in eine AgrarökosystemmodelliererIn nicht gelungen. Ich habe viel von Claas gelernt und wesentlich von der Zusammenarbeit mit ihm profitiert.

Ebenfalls danke ich meinen vielen Kollegen des Instituts, die mir während meiner gesamten Tätigkeit hier am Institut eine große Stütze waren. Viele Gespräche mit ihnen haben weitere Ideen und Anregungen geliefert, die zur Verbesserung dieser Arbeit beigetragen haben. Besonders bedanken möchte ich mich bei Dr. Wilfried Mirschel, Christiane Peter, Kristina Holz und Karin Luzi, die der Arbeit den notwendigen Feinschliff gegeben haben. Dr. Matthias Willms möchte ich danken, da er mir die Gelegenheit zur Mitarbeit im EVA2-Projekt gab und somit erst die Erstellung dieser Arbeit ermöglichte.

Weiterhin möchte ich Prof. Dr. Augustin und Prof. Dr. Sommer danken, die mich gegen Ende der Arbeit auf besondere Art und Weise unterstützten.

Meiner Familie, besonders meinen Eltern und meiner Schwester, möchte ich von ganzem Herzen für ihre Unterstützung, Geduld und Zuversicht danken. Zuletzt, aber nicht weniger herzlichst, möchte ich mich bei meinem liebevollen Ehemann bedanken, der mich immer unterstützte, dabei auch persönliche und finanzielle Einschränkungen erduldet. Jörg schaffte es immer, mich auch in schweren Zeiten zum Lachen zu bringen.